UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

APPLICATION DE LA MÉTHODE DES SOUS-GROUPES AU CALCUL MONTE-CARLO MULTIGROUPE

NICOLAS MARTIN
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE
EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR
(GÉNIE NUCLÉAIRE)
FÉVRIER 2011

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

APPLICATION DE LA MÉTHODE DES SOUS-GROUPES AU CALCUL MONTE-CARLO MULTIGROUPE

présentée par : MARTIN Nicolas .
en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiæ Doctor
a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. MARLEAU Guy, Ph.D., président.
M. HÉBERT Alain, D.Ing., membre et directeur de recherche.
M. KOCLAS Jean, Ph.D., membre et codirecteur de recherche.
M. CHAMBON Richard, Ph.D., membre.
M. HAECK Wim, Ph.D., membre.

A Lise

REMERCIEMENTS

J'aimerais tout d'abord saluer mes nombreux collègues et amis passés par l'Institut de Génie Nucléaire ces quelques dernières années. La qualité du travail réalisé ici est directement reliée aux interactions que j'ai pu avoir avec eux. Je dois mentionner dans le désordre Remi Vallerent, Thibaud Reysset, Marc-André Lajoie et plus récemment Maxime Guyot, Vincent Descotes, Frédéric Simon, Alexis Jinaphanh auxquels je souhaite une brillante fin de cursus, ainsi que tous ceux que j'aurais côtoyé.

Je remercie également le professeur Alain Hébert pour son encadrement et pour m'avoir encouragé à publier et permis de présenter mes travaux dans des conférences. Je remercie ausssi le professeur Guy Marleau qui a accepté de servir de président du jury de thèse, et enfin Richard Chambom et Wim Haeck qui ont accepté de servir comme membres du jury. Je remercie également le FQRNT qui a contribué au financement de ce projet.

Il va sans dire que le travail effectué dans cette thèse aurait essentiellement été impossible sans les contacts noués à l'IRSN/DSU/SEC/LERD, via un stage réalisé au tout début du projet. Je remercie toutes les personnes du laboratoire pour leur sympathique accueil, et pour la qualité des échanges qui auront suivis ces deux dernières années. Un grand merci à Joachim Miss, responsable du LERD, pour l'intérêt porté à cette étude.

RÉSUMÉ

L'objectif de cette thèse est de démontrer la fiabilité d'un algorithme Monte Carlo reposant sur l'utilisation de la méthode des sous-groupes, dans le cadre du calcul de réseau en physique des réacteurs et en criticité. La méthode des sous-groupes, appelée également méthode multibande, se base sur la représentation sous forme de *tables de probabilité* des sections efficaces résonnantes lors de la résolution de l'équation de transport neutronique.

Cette représentation peut se voir à mi-chemin entre l'approche dite ponctuelle et l'approche multigroupe. L'approche ponctuelle, dite également à énergie continue, préserve au maximum la qualité des modèles physiques présents dans le format ENDF. Cependant, l'importante quantité de données nécessaires à ce modèle rend coûteuse son application à grande échelle. La plupart des outils de production en calcul de sûreté-criticité reposent sur l'utilisation de codes Monte Carlo multigroupes, plus rapides en temps de calcul. Le formalisme multigroupe nécessite néanmoins une étape intermédiaire dite d'auto-protection pour le traitement des sections efficaces multigroupes des isotopes résonnants. La méthode des sous-groupes permet de procéder à un calcul direct, conduisant à une simplification du schéma classique reposant sur le formalisme multigroupe. L'intérêt est ici d'obtenir une réduction du coût de calcul vis-à-vis de la méthode à énergie continue tout en conservant un haut niveau de représentation physique.

Plusieurs aspects ont fait l'objet d'une attention toute particulière dans ce projet :

- Le calcul de tables de probabilité cohérentes avec un maillage énergétique comprenant seulement 295 ou 361 groupes. L'approche proposée dans le code CALENDF reposant sur la méthode des moments s'est révélée comme la technique la plus performante pour obtenir des tables de probabilités utilisables dans un code Monte Carlo.
- La combinaison de l'utilisation de tables de probabilité pour le traitement des sections efficaces avec une marche aléatoire reposant sur la méthode de Delta-tracking pour le traitement de la géométrie.
- L'obtention de données cohérentes avec un algorithme Monte Carlo afin de tenir compte de l'anisotropie de la diffusion. Les matrices de transfert sont disponibles sous forme de séries de polynômes de Legendre dans les librairies au format Draglib, mathématiquement inadaptées à une utilisation directe dans un algorithme Monte Carlo. Une solution très efficace consiste à transformer ces moments sous forme de tables de probabilité. Comme dans le code MORET de l'IRSN, la méthode des moments du code

CALENDF a été retenue pour discrétiser la densité de probabilité du cosinus moyen sous forme de tables d'angles discrets.
- L'introduction d'un modèle de fuites basé sur le mode fondamental homogène B_1 lors du calcul de réseau. Contrairement aux codes spectraux déterministes, les codes de Monte Carlo spécialement dédiés à la physique des réacteurs n'introduisent pas de modèle de fuites. La génération des sections efficaces et coefficients de diffusion requiert cependant l'obtention préalable du spectre critique.

Ce sujet a impliqué un important travail de développement, fait dans le cadre d'une version de développement du code de réseau DRAGON. Le code a été programmé en FORTRAN 2003 et est architecturé autour d'un driver écrit en C, la GANLIB 5. Le choix d'un tel langage a permis d'améliorer la qualité du travail grâce à l'utilisation de concepts modernes de programmation, tels que la définition d'objets, l'encapsulation de méthodes au sein de modules internes et l'utilisation du polymorphisme. Finalement, un important travail de validation a été conduit par comparaison avec :

- La méthode Monte Carlo à énergie continue via le code SERPENT.
- La méthode des probabilités de collision (CP), ainsi que la méthode aux ordonnées discrètes (S_N), disponibles au sein du code de transport DRAGON.
- Le code Monte Carlo multigroupe MORET, couplé avec le code DRAGON.

Les différents benchmarks retenus sont issus de problèmes représentatifs de configurations industrielles :

- crayons et assemblages de réacteurs à eau pressurisé (REP).
- assemblages de réacteurs CANDU.
- problèmes de sûreté-criticité, issus des benchmarks de l'ICSBEP (International Criticality Safety Benchmark Evaluation Program).

ABSTRACT

This thesis is dedicated to the development of a Monte Carlo neutron transport solver based on the subgroup (or multiband) method. In this formalism, cross sections for resonant isotopes are represented in the form of probability tables on the whole energy spectrum. This study is intended in order to test and validate this approach in lattice physics and criticality-safety applications.

The probability table method seems promising since it introduces an alternative computational way between the legacy continuous-energy representation and the multigroup method. In the first case, the amount of data invoked in continuous-energy Monte Carlo calculations can be very important and tend to slow down the overall computational time. In addition, this model preserves the quality of the physical laws present in the ENDF format. Due to its cheap computational cost, the multigroup Monte Carlo way is usually at the basis of production codes in criticality-safety studies. However, the use of a multigroup representation of the cross sections implies a preliminary calculation to take into account self-shielding effects for resonant isotopes. This is generally performed by deterministic lattice codes relying on the collision probability method. Using cross-section probability tables on the whole energy range permits to directly take into account self-shielding effects and can be employed in both lattice physics and criticality-safety calculations.

Several aspects have been thoroughly studied:

- The consistent computation of probability tables with a energy grid comprising only 295 or 361 groups. The CALENDF moment approach conducted to probability tables suitable for a Monte Carlo code.
- The combination of the probability table sampling for the energy variable with the delta-tracking rejection technique for the space variable, and its impact on the overall efficiency of the proposed Monte Carlo algorithm.
- The derivation of a model for taking into account anisotropic effects of the scattering reaction consistent with the subgroup method. In this study, we generalize the Discrete Angle Technique, already proposed for homogeneous, multigroup cross sections, to isotopic cross sections on the form of probability tables. In this technique, the angular density is discretized into probability tables. Similarly to the cross-section case, a moment approach is used to compute the probability tables for the scattering cosine.
- The introduction of a leakage model based on the B_1 fundamental mode approximation.

Unlike deterministic lattice packages, most Monte Carlo-based lattice physics codes do not include leakage models. However the generation of homogenized and condensed group constants (cross sections, diffusion coefficients) require the critical flux.

This project has involved the development of a program into the DRAGON framework, written in Fortran 2003 and wrapped with a driver in C, the GANLIB 5. Choosing Fortran 2003 has permitted the use of some modern features, such as the definition of objects and methods, data encapsulation and polymorphism.

The validation of the proposed code has been performed by comparison with other numerical methods:

- The continuous-energy Monte Carlo method of the SERPENT code.
- The Collision Probability (CP) method and the discrete ordinates (S_N) method of the DRAGON lattice code.
- The multigroup Monte Carlo code MORET, coupled with the DRAGON code.

Benchmarks used in this work are representative of some industrial configurations encountered in reactor and criticality-safety calculations:

- Pressurized Water Reactors (PWR) cells and assemblies.
- Canada-Deuterium Uranium Reactors (CANDU-6) clusters.
- Critical experiments from the ICSBEP handbook (International Criticality Safety Benchmark Evaluation Program).

TABLE DES MATIÈRES

LISTE DES TABLEAUX

LISTE DES FIGURES

LISTE DES ANNEXES

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

ENDF	Evaluated Nuclear Data File
TP	Tables de probabilité
CP,P_{ij}	Méthode des probabilités de collision
MoC	Méthode des caractéristiques
S_N	Méthode aux ordonnées discrètes
D.A.T.	Méthode des angles discrets
PWR, REP, REL	Réacteur à eau pressurisé
CANDU	Réacteur à eau lourde
CALENDF	Méthode des moments pour le calcul des tables de probabilité
IRSN	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
ICSBEP	International Criticality Safety Benchmark Experimental Programm
pcm	Pour cent mille (10^{-5})
k_{eff}	Facteur de multiplication effectif
k_∞	Facteur de multiplication infini

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

Cette étude aborde la problématique du transport neutronique intervenant en physique des réacteurs et en calcul de sûreté-criticité. L'équation de transport (équation linéaire de Boltzmann) régissant le comportement moyen des neutrons est issue de la mécanique statistique et décrit l'évolution d'un ensemble de particules neutres dans un milieu donné. Deux importantes classes de méthodes numériques existent comme techniques de résolution de l'équation de transport : les méthodes *déterministes* et les méthodes *stochastiques* dites de *Monte Carlo* (Hébert, 2009; Lewis et Miller Jr., 1993; Lux et Koblinger, 1990).

Dans le cadre des méthodes dites déterministes, le flux neutronique est obtenu par discrétisation des variables spatiales, angulaires et énergie. Dans l'approche Monte Carlo, on procède par simulation aléatoire du comportement individuel d'un très grand nombre de particules et par encaissement de certains événements. Le comportement moyen des particules en est alors déduit par application du théorème central limite.

Ces deux méthodes résolvent donc le même problème par deux approches totalement distinctes. Les solutions ne sont d'ailleurs pas les mêmes dans les deux cas : si dans l'approche déterministe, la globalité des paramètres dans l'espace des phases (flux, taux de réactions, etc.) est connue après résolution, le cas stochastique ne fournira que les solutions demandées lors de la définition des grandeurs « scorées » ou « encaissées » (les « tallies »), chacune étant entâchée d'*une erreur statistique*. Les résultats d'une simulation Monte Carlo sont ainsi des variables aléatoires.

Chaque méthode possède ses avantages et ses points faibles. La discrétisation de l'espace des phases intervenant dans les méthodes déterministes limite la plage de géométries solvables, ainsi que le type de données physiques utilisables en entrée. Les méthodes déterministes sont cependant plus performantes en terme de temps de calcul que l'approche stochastique.

L'approche stochastique peut ne requérir aucune discrétisation des variables et est donc particulièrement adaptée aux cas multidimensionnels. Un autre avantage est la relative simplicité

à paralléliser les algorithmes Monte Carlo, souvent qualifiés comme étant « embarrassingly parallelisable ». La quasi totalité des codes Monte Carlo de production (MCNP5, TRIPOLI4, KENO6, etc.) peuvent être utilisés sur des clusters. Par ailleurs, il y est plus aisé de préserver la qualité des modèles physiques, c'est-à-dire les sections efficaces et des lois d'interaction des neutrons avec la matière. Les algorithmes de Monte Carlo sont néanmoins coûteux en terme de temps de calcul. Dans le cas d'un algorithme de Monte Carlo pour le transport neutronique, il est possible d'utiliser trois types de données :

- Des sections efficaces *macroscopiques*, qui doivent être générées alors par un code de réseau (code spectral). C'est cette option qui est utilisée en calcul de criticité par exemple avec le code MORET.
- Des sections efficaces sous forme de tables de probabilité, conduisant à la méthode des sous-groupes (ou méthode multibande) en transport neutronique. Elles sont au cœur de cette étude.
- Des sections efficaces ponctuelles (pouvant aller jusqu'à plusieurs dizaine de milliers de points sur le spectre énergétique classique [0, 20 MeV]), correspondant aux données présentes dans les évaluations via par exemple le format ACE (*A compact ENDF*) de NJOY. Par interpolation, il est possible de générer les sections efficaces à n'importe quelle énergie. On parle alors de code Monte Carlo à énergie continue. Notons finalement que les données ponctuelles sont à la base des deux autres formalismes.

En calcul de production pour les réacteurs ou en sûreté-criticité, l'importante hétérogénéité des configurations ne permet pas la résolution de l'équation de transport sur la géométrie exacte. Un cœur de réacteur REP est constitué de plusieurs dizaine de milliers de crayons de combustible par exemple. Comme cela sera détaillé au chapitre 2, l'approche classique consiste à passer par une étape d'homogénéisation, généralement sur une géométrie simplifiée mais représentative du problème, et d'utiliser les données homogénéisées dans un deuxième niveau de calcul simplifié. L'étape initiale d'homogénéisation est réalisée sur une cellule élémentaire avec des conditions de périodicité : on parle de calcul de réseau.

Dans le cas du calcul de réacteur, la deuxième étape est généralement une simulation à l'échelle entière du réacteur en utilisant ces données macroscopiques, typiquement à l'aide d'un opérateur dégradé comme la diffusion. Quand aux schémas de calcul en sûreté-criticité, ils sont basés sur des calculs Monte Carlo utilisant ces grandeurs homogénéisées. La méthode Monte Carlo permet ici une description poussée des nombreuses configurations géométriques rencontrées dans ce type d'étude, tandis que l'utilisation de données homogénéisées permet une réduction importante du temps de calcul.

Les codes déterministes architecturés autour des méthodes intégrales telles que la méthode des probabilités de collision (P_{ij}) ou de la méthode des caractéristiques (MoC) servent couramment d'outils de production de données macroscopiques. Les codes Monte Carlo servent majoritairement d'outils de validation des schémas déterministes. Néanmoins la puissance croissante des ordinateurs et l'avènement d'ordinateurs massivement parallèles favorisent le remplacement des méthodes déterministes par des techniques Monte Carlo.

Un exemple parmi d'autre est l'apparition d'outils Monte Carlo spécialement dédiés au calcul de réacteur. Ainsi le code SERPENT (Leppänen, 2010b), développé depuis quelques années au centre de recherche Finlandais VTT, est spécialement conçu pour le calcul de réseau. Les optimisations apportées pour le calcul de réseau conduisent à des performances supérieures aux codes généralistes (MCNP, TRIPOLI) et s'approchent des temps de calcul des codes déterministes, tout en exploitant au maximum les informations disponibles dans le format ENDF. On limite ainsi de manière importante les approximations faites au niveau des lois d'interactions physiques des neutrons avec la matière.

Ce projet s'inscrit dans la même ligne de conduite, avec comme objectif l'obtention d'un code purement Monte Carlo pour le calcul de réseau, en mode fondamental, avec comme spécificité la représentation des sections efficaces sous forme de tables de probabilité pour les isotopes résonnants.

1.2 Problématique de cette thèse

La problématique centrale de cette thèse est de fournir une réponse à la question suivante :

- ***La méthode Monte Carlo avec tables de probabilité peut-elle être utilisée pour le calcul de réseau en mode fondamental ?***

Cette question amène d'autres interrogations, typiquement :

- Quel formalisme utiliser afin de correctement calculer les tables de probabilité ?
- Un maillage énergétique comprenant seulement 295 groupes est-il suffisant ?
- Quel est l'impact de l'utilisation de poids corrélés (tables de probabilité 2D) dans un algorithme Monte Carlo ?
- Quelles techniques peut-on utiliser pour le traitement de l'anisotropie ?
- Peut-on implanter un modèle de fuites similaire aux codes déterministes ?

L'intérêt principal de la représentation en tables de probabilité est la réduction du coût de calcul comparativement à la représentation ponctuelle, tout en apportant une solution élégante à la problématique du calcul d'auto-protection due à l'approximation multigroupe.

La représentation sous forme de tables de probabilité permet en effet de conserver un maximum d'informations dans un format dense, comme nous le détaillerons dans la suite de ce document.

1.3 Recherches similaires réalisées ou en cours

L'utilisation de la méthode des tables de probabilité dans le cadre d'un code Monte Carlo pour la simulation du transport neutronique est apparue simultanément en ex-URSS et aux USA à la fin des années 1970. Cullen, avec le code TART du LLNL (Cullen, 2005) est le premier à proposer l'utilisation de la méthode multibande sur la totalité du spectre énergétique. Un maillage énergétique comprenant 700 groupes avec des tables de probabilité d'ordre 2 par groupe sont utilisées dans la version 2005 du code. Le formalisme invoqué afin de calculer les tables de probabilité a évolué au fil du temps pour finalement être équivalent à la méthode des moments (Cullen, 1974, 1977, 1980, 1986). L'anisotropie de la diffusion est traitée de manière similaire au cas à énergie continue. Les applications du code TART sont principalement en sûreté-criticité. Le calcul de réacteur n'est pas envisagé.

Une importante étude a été également réalisée au sein du code TRIPOLI au CEA concernant l'utilisation de tables de probabilité pour le calcul de protection (Zheng *et al.*, 1998). Le code CALENDF (Ribon et Maillard, 1986) est utilisé afin de générer des tables de probabilité sur différents types de maillages uniformes en léthargie (de 27 à 2592 groupes). L'anisotropie est considérée de manière isotrope. Les applications étudiées sont des problèmes de calcul de fluence et des problèmes à source, aucune application en calcul de réacteurs n'est mentionnée. Les dernières versions du code TRIPOLI4 permettent l'utilisation de tables de probabilité, mais cette voie de calcul semble peu utilisée en pratique. Une récente étude présente néanmoins une formalisation de l'équation de transport adjointe basée sur la représentation en tables de probabilité (Diop *et al.*, 2010).

La méthode des sous-groupes n'est pas restreinte aux codes Monte Carlo. De nombreuses techniques d'auto-protection reposent sur ce formalisme. Ici, on mentionne uniquement les études où la méthode des sous-groupes est utilisée afin de résoudre l'équation de transport. Les premières études dans ce domaine ont été faites en ex-URSS par Nikolaev pour différentes techniques de résolution de l'équation de transport sous la forme intégrale (Nikolaev *et al.*, 1970, 1972). L'application au cas Monte Carlo suivra (Korobeinikov et Nikolaev, 1979). Cela conduira d'ailleurs a une dispute entre l'école russe et américaine afin de savoir qui proposa en premier la méthode (voir (Nikolaev, 1976) pour plus de détails), en plus d'une redondance

entre les termes sous-groupe (école russe) et multibande (école américaine). La méthode des sous-groupes a été ensuite adaptée à la méthode des ordonnées discrètes (S_N). Une importante étude a ainsi été réalisée au CEA concernant le développement d'une méthode S_N 1D résolvant les équations des sous-groupes (Lunéville, L., 1998). Le code est appliqué à des problèmes de blindage et de protection. Mais le groupe de recherche actuellement le plus actif sur la matière se trouve au Japon, où l'on retrouve de nombreuses tentatives d'application de la méthode S_N avec sous-groupes pour le calcul de réacteurs à neutrons rapides (voir (Yamamoto et Takeda, 2000; Chiba, 2003; Chiba et Kugo, 2010) et les articles associés).

En résumé, la méthode Monte Carlo avec sous-groupes n'a été précédemment envisagée sur la totalité du spectre que dans le cadre de problèmes de protection (*shielding*) et de configurations de sûreté-criticité avec TART. Contrairement aux études précédentes, cette étude s'oriente tout particulièrement pour le calcul de réacteurs thermiques. En particulier, un aspect important de ce projet a reposé sur l'utilisation de maillages énergétiques dérivés initialement pour le calcul de réseau et comportant un faible nombre de groupes (Hébert, 2008). La totalité des autres codes utilisent des maillages uniformes en léthargie (700 groupes pour TART, jusqu'à 2592 pour TRIPOLI). Ceci nous permet d'utiliser une approche hybride multigroupe/sous-groupe où les sections efficaces résonnantes sont résolues de par la structure même du maillage dans la partie thermique (typiquement jusqu'à 22.5 eV pour SHEM–361). Il est cependant nécessaire de démontrer que l'utilisation de tels maillages ne conduit à aucun biais dans des calculs Monte Carlo. Un point particulier sera l'utilisation de poids corrélés dans le cadre d'un algorithme Monte Carlo. Ce formalisme expérimental a été proposé dans les méthodes d'auto-protection des codes de réseau, afin de tenir compte des effets d'interférence ou de recouvrement intervenant lorsque plusieurs résonances se superposent (Hébert et Coste, 2002; Hébert, 2008).

Concernant le traitement de l'anisotropie, la méthode des angles discrets (DAT pour *discrete angle technique*), initialement proposée pour des codes Monte Carlo utilisant des données macroscopiques, est généralisée au cas sous-groupe. Ceci n'a jamais été réalisé auparavant. Il existe par ailleurs d'autres approches possibles, comme traiter la collision similairement au cas à énergie continue. Dans ce cas, il faut récupérer en entrée les données ponctuelles nécessaires au traitement de l'anisotropie de la diffusion. Nous souhaitons dans cette étude essentiellement valider la méthode Monte Carlo avec sous-groupes sur des configurations anisotropes telles que rencontrées couramment en criticité. Ainsi, l'approche DAT permet de transcrire l'information présente dans les données multigroupes de manière à pouvoir les utiliser correctement dans un code Monte Carlo. Ceci a été fait dans le but d'éviter de mo-

difier le format des librairies d'entrée de DRAGON, ce qui est une tâche plutôt délicate. L'approche DAT et les méthodes semi-analytiques de Lux et Coveyou sont par ailleurs issues directement du code MORET. Ceci a été rendu possible grâce à un échange avec l'équipe de développement du code MORET à l'IRSN. La validation des méthodes est d'ailleurs largement réalisée dans (Le Cocq, 1998), que nous ne reprendrons pas dans cette étude.

Enfin, l'implémentation d'un modèle de fuite pour le calcul Monte Carlo est un sujet de recherche actif. Une approche proposée dans (Yun et Cho, 2010) consiste à modifier itérativement les conditions d'albédo afin de converger vers $k_{eff} = 1$. Une première tentative d'adaptation du modèle B_1 au calcul Monte Carlo a été proposée dans (Shim *et al.*, 2008b), mais leur méthodologie repose sur deux étapes. Un premier calcul Monte Carlo à énergie continue via le code McCARD est réalisé pour génèrer les sections efficaces homogènes requises par le modèle B_1, condensées sur une structure multigroupe. Les équations B_1 sont résolues, conduisant au flux critique. Le flux critique obtenu est ensuite utilisé afin de condenser les sections efficaces obtenues initialement en deux groupes (un rapide et un thermique) pour utilisation dans un code de cœur. Cette méthodologie sera ensuite implémentée dans le code SERPENT à partir de la version 1.1.14 disponible en novembre 2010. Nous proposons dans cette étude d'imbriquer le modèle B_1 directement au niveau du calcul de la valeur propre, de manière rigoureusement identique au cas déterministe (voir (Hébert, 2009) Sect 4.3).

1.4 Organisation du document

On présente au chapitre 2 l'équation de transport neutronique ainsi que les schémas de calcul utilisés en physique des réacteurs et en criticité. La méthode de Monte Carlo y est également décrite.

Le chapitre 3 décrit le formalisme des tables de probabilité et son application en transport neutronique dans le cadre de la méthode des sous-groupes. On y détaille également l'algorithme de marche aléatoire dans le cadre d'un code Monte Carlo reposant sur la méthode des sous-groupes.

Après une brève description des différentes méthodes de calcul des tables de probabilité présentes dans la littérature, le chapitre 4 présente en détail le formalisme mathématique invoquée par la méthode des moments. Cette méthode a été proposée par P. Ribon au CEA pour le code CALENDF au début des années 1980. Ce sont ces tables de probabilité qui seront principalement utilisées dans cette étude.

Le chapitre 5 présente le cadre d'implantation de la méthode Monte Carlo avec tables de probabilité et détaille l'algorithme programmé.

Les résultats obtenus via la méthode Monte Carlo sur des cellules et assemblages REP et CANDU sont discutés au chapitre 6. Un point particulier sera notamment l'influence des poids corrélés.

Le chapitre 7 détaille la méthode des angles discrets dans le cadre des sections efficaces sous forme de tables de probabilité.

L'implantation d'un modèle de fuite basée sur l'approximation B_1 homogène dans le cadre d'un calcul Monte Carlo est finalement décrite au chapitre 8.

CHAPITRE 2

SIMULATION DU TRANSPORT NEUTRONIQUE

2.1 L'équation de transport : une équation de bilan

L'équation de transport neutronique, obtenue sans aucune approximation par bilan de la population neutronique dans l'espace des phases considérés (Lewis et Miller Jr., 1993), s'écrit dans le cas d'un milieu à l'équilibre :

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E)\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) \tag{2.1}$$

Avec :

- $\mathbf{r}$ la variable d'espace, $\mathbf{\Omega} = \left(\sqrt{1-\mu^2}\cos\psi, \sqrt{1-\mu^2}\sin\psi, \mu\right)$ variable angulaire, et E variable énergie ;
- $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ le flux neutronique dans l'élément d'hypervolume $d^3r d^2\Omega dE$ autour de $\{\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E\}$. Ce flux n'est pas un flux au sens physique du terme (i.e., on ne peut pas le mesurer directement), mais une définition mathématique à partir du produit des deux grandeurs physiques qui sont la densité neutronique $n(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ et la vitesse $v(E)$ du neutron à l'énergie E ;
- $\mathbf{\Omega} \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ représente le terme de fuite des neutrons dans l'élément de volume d^3r autour de $\mathbf{r}$;
- $\Sigma_t(\mathbf{r}, E)\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ le terme représentant le nombre de neutrons quittant l'élément d'hypervolume par l'ensemble des interactions possibles avec la matière ;
- $Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ le terme représentant l'ensemble des sources de neutrons :

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = &\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}', E \leftarrow E') \\ &+ \sum_{j=1}^{J^{\text{fiss}}} \chi_j(\mathbf{r}, E) \int_0^\infty dE' \nu\Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E') \int_{4\pi} \frac{d^2\Omega'}{4\pi} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') \\ &+ S_{ext}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) \end{aligned} \tag{2.2}$$

Toutes les grandeurs macroscopiques apparaissant sont connues à priori :

- Σ_t, la section efficace totale ;
- Σ_s, la section efficace macroscopique de diffusion ;
- $\Sigma_{f,j}$, la section efficace de fission pour l'isotope j ;

- ν, le nombre de neutrons secondaires produits par fission ;
- χ_j, le spectre de fission de l'isotope fissile j, défini tel que $\chi_j(E)dE$ est le nombre de neutrons émis par fission à l'énergie E à dE près pour l'isotope j.

Du point de vue mathématique, il convient de fermer le système et d'introduire des conditions aux limites afin de résoudre l'équation de transport. On introduit ici une expression générale reliant flux sortant et flux rentrant à la frontière ($\mathbf{r} \in \partial D, \mathbf{\Omega}_{|_{\mathbf{\Omega}\cdot\overrightarrow{N}^{\text{out}}<0}}$) du domaine :

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = \int_{\partial D} d^2r' \int_{\mathbf{\Omega}\cdot\overrightarrow{N}^{\text{out}}>0} d^2\Omega'(\mathbf{\Omega}' \cdot \overrightarrow{N}'^{\text{out}})\beta(\mathbf{r}', \mathbf{\Omega}' \to \mathbf{r}, \mathbf{\Omega})\phi(\mathbf{r}', \mathbf{\Omega}', E) \tag{2.3}$$

Avec $\overrightarrow{N}^{\text{out}}$ (resp. $\overrightarrow{N}'^{\text{out}}$) le vecteur normal à la frontière sortante en $\mathbf{r}$ (resp. $\mathbf{r}'$). Le noyau $\beta(\mathbf{r}', \mathbf{\Omega}' \to \mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ représente la contribution du flux sortant du domaine en $(\mathbf{r}', \mathbf{\Omega}')$ au flux rentrant en $(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$.

L'équation 2.1 représente de manière générale un bilan macroscopique dans l'hypervolume $d^3rd^2\Omega dE$ autour de $\{\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E\}$ entre disparition des neutrons, symbolisée par les termes de gauche, et production, représenté par le terme de droite $Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$.

Dans le cas particulier d'absence de source externe ($S_{\text{ext}}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = 0$), le système décrit par l'équation résultante est dit critique, la réaction en chaîne de production de neutrons est stationnaire et auto-entretenue. Il y a alors équivalence entre le concept de milieu critique et milieu stationnaire. Dans le cas plus général, l'équilibre initialement supposé n'est pas garanti et l'équation de transport n'a à priori pas de solutions. Il est donc nécessaire de forcer l'existence de cette solution en introduisant une variation des paramètres du système. L'approche la plus usuelle est de reformuler l'équation 2.1 sous la forme d'un problème à valeurs propres en divisant le terme de source issue de la fission

$$\sum_{j=1}^{J^{fiss}} \chi_j(\mathbf{r}, E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E') \int_{4\pi} \frac{d^2\Omega'}{4\pi} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') \tag{2.4}$$

par une constante k_{eff}, facteur de multiplication effectif. L'équation de transport devient alors :

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E)\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}', E \leftarrow E') + \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{J^{\text{fiss}}} \chi_j(\mathbf{r}, E) \int_0^\infty dE' \nu\Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, E') \int_{4\pi} \frac{d^2\Omega'}{4\pi} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') \tag{2.5}$$

La complexité de la résolution de l'équation 2.5 croît en fonction de l'hétérogénéité du problème. En effet, plus la géométrie comportera de milieux différents, plus le nombre de paramètres (sections efficaces) sera important.

2.2 Traitement de la variable énergie : l'approximation multigroupe

L'approche multigroupe consiste à subdiviser le domaine d'énergie en G groupes dans lesquels les neutrons seront considérés comme monocinétiques. Les quantités dépendant de l'énergie seront ensuite condensées sur chaque groupe.

On utilise de manière courante la variable léthargie $u = ln(E_0/E)$ sur le domaine énergétique $[0, E_0]$, de tel sorte que :

$$W_g = \{u; u_{g-1} \leq u < u_g\} = \{E; E_g < E \leq E_{g-1}\}; \qquad g = 1, G \tag{2.6}$$

avec $u_g = ln(E_0/E_g)$ et $u_0 = 0$. Le spectre d'énergie est divisé en G groupes $]E_g, E_{g-1}[$ avec $g = [1, G]$. Les groupes de plus hautes énergies se retrouvent donc en premier, $E_0 > E_1 ... > E_G$.
On peut dès lors exprimer l'équation de transport en formalisme multigroupe :

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla\phi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + \Sigma_g(\mathbf{r})\phi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = Q_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \tag{2.7}$$

Avec désormais la relation suivante pour le terme source :

$$Q_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \sum_{g'=1}^{G} \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s^{g \leftarrow g'}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} \leftarrow \mathbf{\Omega}')\phi_{g'}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') + \frac{1}{K_{\text{eff}}} \sum_{j=1}^{J^{\text{fiss}}} \chi_{j,g}(\mathbf{r}) \sum_{g'=1}^{G} \nu\Sigma_{f,j,g'}(\mathbf{r}) \int_{4\pi} \frac{d^2\Omega'}{4\pi} \phi_{g'}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') \tag{2.8}$$

La principale difficulté du formalisme multigroupe est l'évaluation des sections efficaces multigroupes. Celles-ci sont définies de manière à conserver les taux de réactions dans le groupe d'énergie considéré, par rapport à un calcul continu en énergie. On considère ici le flux scalaire $\phi(\mathbf{r}, u) = \int_{4\pi} d^2\Omega\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', u)$ et la section efficace microscopique σ, telle que $\Sigma = N\sigma$, N densité isotopique.

$$\sigma_{\rho,g}(\mathbf{r}) = \frac{\langle\sigma_\rho(\mathbf{r}, u)\phi(\mathbf{r}, u)\rangle_g}{\langle\phi(\mathbf{r}, u)\rangle_g} \tag{2.9}$$

Le calcul des sections efficaces implique donc la connaissance du flux $\phi(\mathbf{r}, u)$. Celui-ci étant initialement inconnu, l'approche usuelle consiste à remplacer le flux réel par un flux de référence $\phi_0(u)$, pour chaque zone homogène de la géométrie considérée. Les sections efficaces multigroupes s'expriment alors par les relations suivantes :

$$\sigma_{\rho,g} = \frac{\int_g du\sigma_\rho(u)\phi_0(u)}{\int_g du\phi_0(u)} \tag{2.10}$$

Et pour les sections efficaces de transfert :

$$\sigma^{g\to g'} = \frac{\int_{g'} du' \int_g du\sigma_s(u \to u')\phi_0(u)}{\int_g du\phi_0(u)} \tag{2.11}$$

Les sections efficaces multigroupes sont déterminées en amont des codes de réseau, typiquement par le code NJOY et son module GROUPR (MacFarlane et Muir, 2000). Un flux analytique ϕ_0 est utilisé, représentatif au maximum du flux réel obtenu dans le réacteur. En pratique, il s'agit d'un spectre de fission à haute énergie (quelques MeV), suivi d'un spectre en 1/E modélisant le ralentissement des neutrons, puis d'un spectre maxwellien dans le domaine thermique. Cependant cette approche faillit dans certains cas, où la dépendance spatiale des sections efficaces n'est pas bien prise en compte par le flux analytique. Cela est corrigé lors de l'étape d'auto-protection des résonances, qui consiste à rajouter une itération entre le calcul du flux et le calcul des sections efficaces. Notons que la plupart des codes de réseaux pour les réacteurs thermiques découplent les deux étapes. Dans cette étude, nous éliminerons cette problématique en remplaçant les sections efficaces multigroupes par des tables de probabilité pour obtenir un formalisme sous-groupe de l'équation de transport, décrit au chapitre 3.

2.3 L'approche stochastique

Les méthodes de Monte Carlo pour le transport neutronique sont apparues en même temps que l'avènement des premiers ordinateurs avec les travaux de Von Neumann, Ulam, Fermi, Metropolis et autres à Los Alamos (Metropolis, 1987). Cette méthode numérique

s'adapte particulièrement bien à la modélisation de phénomène stochastique (comme le transport de particules), et s'est généralisée par la suite en une technique d'intégration très robuste. On retrouve des algorithmes Monte Carlo dans pratiquement toutes les branches des mathématiques appliquées : astrophysique, mécanique des fluides, chimie quantique, mathématiques pour la finance, météorologie, microbiologie, etc.

Une définition précise du terme « méthode de Monte Carlo » est difficile à trouver dans la littérature. Certains auteurs définissent comme méthode de Monte Carlo toute technique faisant appel à des nombres pseudo aléatoires générées par un ordinateur. On retiendra ici la définition présentée dans (Lux et Koblinger, 1990), où l'on définit comme méthode de Monte Carlo toute *technique numérique faisant intervenir la construction d'un modèle stochastique pour lequel l'espérance d'une variable aléatoire est équivalente à une grandeur physique que l'on cherche à déterminer*.

De manière générale, ces méthodes évaluent le comportement moyen (ou le plus probable) d'un système physique par l'observation des résultats d'un *jeu aléatoire* modélisant les évènements physiques. La simulation repose sur l'utilisation d'une séquence de *nombres aléatoires* et est basée sur l'*échantillonnage statistique*. On peut ainsi considérer la méthode de Monte Carlo comme une technique d'*expérimentation numérique*. Ainsi en neutronique, les trajectoires des particules et leurs lois d'interaction avec la matière sont simulées de manière stochastique par tirage aléatoire, jusqu'à convergence statistique des résultats.

La simulation s'opère directement en suivant les lois d'interaction neutrons-noyaux définies par les sections efficaces et les distributions angulaires, qui sont par définition des notions statistiques (i.e., des probabilités). En pratique, la vie d'un neutron est simulée à partir de son émission (fission ou source fixe), jusqu'à sa mort par capture, fission ou par fuite à l'extérieur du système. Les interactions du neutron avec l'environnement sont simulées par tirage aléatoire, suivant les lois de collisions et les sections efficaces des matériaux.

2.3.1 Quelques définitions mathématiques

On présente dans cette section les quelques notions statistiques nécessaires à la compréhension de la méthode de Monte Carlo, en utilisant les notations utilisées dans (Hébert, 2009). Plusieurs ouvrages de référence peuvent être consultés, notamment (Lux et Koblinger, 1990) et (Bielajew, 2001) pour la méthode de Monte Carlo dans le cas général du transport de particules, et (Spanier et Gelbard, 1969) pour le transport neutronique.

Soit ξ une variable aléatoire définie sur le support $\mathcal{D}$. La fonction $\xi \to f(\xi)$ est alors aussi une variable aléatoire. L'espérance de $f(\xi)$ est définie en fonction de la densité de probabilité $p(\xi)$, tel que $p(\xi)d\xi$ représente la probabilité pour la variable aléatoire ξ d'avoir une valeur comprise entre ξ et $\xi + d\xi$:

$$E\left[(f(\xi)\right] = \int_{\mathcal{D}} d\xi p(\xi) f(\xi) \tag{2.12}$$

On définit la variance de $f(\xi)$ par la relation suivante :

$$Var[f(\xi)] = \int_{\mathcal{D}} d\xi p(\xi) \left\{f(\xi) - E\left[(f(\xi)\right]\right\}^2 \tag{2.13}$$

L'écart-type associé étant alors : $\sigma[f(\xi)] = \sqrt{Var[f(\xi)]}$. De plus, on définit la fonction de répartition $P(\xi)$ telle que la probabilité pour la variable aléatoire ξ d'avoir une valeur plus petite que x sera donnée par la relation suivante :

$$P(x) = P(\xi < x) = \int_{-\infty}^{x} d\xi p(\xi) \tag{2.14}$$

D'où :

$$p(\xi)d\xi = dP(\xi) \tag{2.15}$$

On peut écrire l'espérance et la variance suivant la fonction de répartition :

$$E\left[(f(\xi)\right] = \int_{\mathcal{D}} dP(\xi) f(\xi) \ , \tag{2.16}$$

et

$$Var[f(\xi)] = \int_{\mathcal{D}} dP(\xi) \left\{f(\xi) - E\left[(f(\xi)\right]\right\}^2 \ . \tag{2.17}$$

La sélection de valeurs aléatoires de $f(\xi)$ à partir de la densité de probabilité $p(\xi)$ est un processus appelé *tirage aléatoire* ou *échantillonnage statistique*. Elle constitue l'étape clé du processus de Monte Carlo. L'approche la plus simple est connue sous le nom de méthode d'inversion, au cours de laquelle l'échantillonnage de la variable ξ se fait à partir de la fonction de répartition.

On sélectionne dans un premier temps un nombre aléatoire r uniformément distribué dans l'intervalle $[0, 1[$. La valeur aléatoire tirée est alors mise égale à la fonction de répartition de l'évènement, de telle sorte que la valeur correspondante ξ peut être déterminée en inversant celle-ci :

$$P(\xi) = r \Leftrightarrow \xi = P^{-1}(r) \tag{2.18}$$

Les valeurs de la variable aléatoire ξ échantillonnée suivant cette technique seront distribuées suivant la densité de probabilité $p(\xi)$. L'espérance de $f(\xi)$ s'écrit alors :

$$E[(f(\xi)] = \lim_{N\to\infty} E_N[f(\xi)] \tag{2.19}$$

Avec :

$$E_N[f(\xi)] = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} f[P^{-1}(r_n)] \tag{2.20}$$

N est le nombre de tirages, typiquement entre quelques milliers et quelques millions de valeurs sont nécessaires. L'écart-type estimé s'écrit dans ce cas :

$$\sigma[f(\xi)] = \lim_{N\to\infty} \sigma_N[f(\xi)] \tag{2.21}$$

Avec :

$$\sigma_N[f(\xi)] = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \left\{f[P^{-1}(r_n)] - E[f(\xi)]\right\}^2} \tag{2.22}$$

On présentera par la suite les propriétés régissant la convergence d'un algorithme Monte Carlo.

2.3.2 Algorithme de simulation d'un calcul de criticité

Comme cela a été énoncé précédemment, la méthode de Monte Carlo simule la vie d'un neutron suivant une succession d'évènements déterminés de manière stochastique, par l'intermédiaire de lois de probabilité. On présente ici schématiquement l'algorithme de résolution d'un calcul Monte Carlo pour le calcul de criticité, où l'on cherche à déterminer le coefficient de multiplication effectif k_{eff}. On cherche alors à résoudre l'équation 2.5, qui s'écrit sous forme matricielle :

$$(\mathbf{L} + \mathbf{T})\,\Phi = \mathbf{S}\Phi + \frac{1}{k_{\text{eff}}}\mathbf{M}\Phi \tag{2.23}$$

Avec :

- **L** opérateur de fuites
- **T** opérateur de collision
- **S** opérateur de diffusion
- **M** opérateur de multiplication par fission

La méthode d'itération de puissance est alors utilisée, conduisant au problème suivant :

$$(\mathbf{L} + \mathbf{T} - \mathbf{S})\,\Phi^{(n+1)} = \frac{1}{k_{\text{eff}}^{(n)}}\mathbf{M}\Phi^{(n)} \tag{2.24}$$

Dans ce cas, la méthode de Monte Carlo procède par cycles (ou génération, ou encore batchs), au cours de laquelle la distribution des sources à un cycle est donnée par les sites de fission de la génération précédente. En général, Φ^0 est distribué uniformément ou peut être spécifié par l'utilisateur. Chaque génération comprend un certain nombre de neutrons, chacun exécutant une marche aléatoire à travers la géométrie suivant l'algorithme détaillé ci-après. La méthode utilisée ici se base sur des itérations de puissance, très similaire au cas déterministe.

Il existe néanmoins d'autres approches Monte Carlo pour l'échantillonnage des sources de fission, comme la méthode des matrices de fission ou la méthode de Wielandt, par exemple (Brown, 2009). Ces techniques ont été développées afin d'éviter les problèmes reliés à la convergence des sources. Nous nous limiterons dans cette étude au cas classique d'itération de puissance, où le coefficient de multiplication effectif au cycle n est donné par

$$k_{eff}^{(n)} = \frac{\text{nombre de neutrons source au cycle n+1}}{\text{nombre de neutrons source au cycle n}} \tag{2.25}$$

On présente par la suite une description d'un algorithme Monte Carlo utilisant des sections efficaces sous forme multigroupe, comme programmé au sein du module `MC:`. Notons qu'il s'agit d'une implémentation possible d'un algorithme Monte Carlo multigroupe, et de nombreuses variantes existent. On décrit ici la marche aléatoire d'une particule donnée en se plaçant dans la géométrie considérée. Ce processus est répété pour les N neutrons de la génération considérée, puis pour les M cycles nécessaires à la convergence statistique sur le k_{eff}.

- La naissance du neutron, à la position $\mathbf{r}$, tirée à partir de la distribution initiale des sources. La direction $\boldsymbol{\Omega}$ est sélectionnée de manière isotrope. Le groupe d'énergie g est choisi à partir du spectre d'émission des neutrons dans le milieux considéré.
- A chaque émission d'un neutron, une trajectoire est créée. La notion de trajectoire fait ici référence à la somme de chaque composante du parcours géométrique réalisé par la particule, jusqu'à une collision. Dans une cellule géométrique donnée, la probabilité de collision du neutron le long de sa trajectoire entre s et $s + ds$ est donnée par :

$$p(s)ds = e^{-\Sigma_t s}\Sigma_t ds \tag{2.26}$$

  Avec Σ_t, section efficace macroscopique totale, interprétable comme la probabilité de collision par unité de distance. On pose ξ nombre aléatoire dans $[0, 1[$ tel que :

$$\xi = \int_0^x p(s)ds = \int_0^x e^{-\Sigma_t s}\Sigma_t ds = 1 - e^{-\Sigma_t x} \tag{2.27}$$

D'où :

$$x = -\frac{1}{\Sigma_t} ln(1-\xi) \tag{2.28}$$

Ou encore par symétrie des distributions des valeurs de $1-\xi$ et ξ :

$$x = -\frac{1}{\Sigma_t} ln(\xi) \tag{2.29}$$

Cette relation est au cœur de tout code de transport de particules neutres basé sur la méthode de Monte Carlo. La position de la prochaine collision sera alors :

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + x\mathbf{\Omega}. \tag{2.30}$$

- si $\mathbf{r}'$ est à l'extérieur du milieu, le neutron est positionné à la frontière entre les deux milieux.
  - soit le neutron entre dans le nouveau milieu, en ce cas un nouvel échantillonnage du parcours avant collision a lieu, cette fois-ci en prenant en compte la section efficace du nouveau milieu.
  - soit le neutron se positionne à la frontière du système :
    - le neutron peut être renvoyé dans le système en cas de reflexion, un nouveau tirage de la longueur de parcours est réalisé.
    - la particule "fuit" à l'extérieur de la géométrie. L'histoire du neutron est terminée.
- Si le parcours du neutron ne l'entraîne pas à l'extérieur du milieu, alors une collision a lieu en $\mathbf{r}'$. On définit $\Sigma_t^g = \Sigma_a^g + \Sigma_s^g$, avec $\Sigma_a^g = \Sigma_f^g + \Sigma_c^g$ et $\Sigma_s^g = \Sigma_{scat}^g + \Sigma_{n,2n}^g + \Sigma_{n,3n}^g$. Une première particularité est de traiter les réactions (n, xn) telles que des réactions de diffusion. La section efficace d'absorption est ici la somme de la section efficace de capture et de la section efficace de fission. On définit alors les probabilités d'occurence de chaque réaction :
  - $P_s = \frac{\Sigma_s^g}{\Sigma_t^g}$, probabilité d'obtenir une réaction de diffusion incluant les réactions (n, xn)
  - $P_{scat} = \frac{\Sigma_{scat}^g}{\Sigma_t^g}$, probabilité d'obtenir une réaction de diffusion ;
  - $P_{n,2n} = \frac{\Sigma_{n,2n}^g}{\Sigma_t^g}$, probabilité d'obtenir une réaction $(n, 2n)$;
  - $P_{n,3n} = \frac{\Sigma_{n,3n}^g}{\Sigma_t^g}$, probabilité d'obtenir une réaction $(n, 3n)$.

  Si $P_s \geq \xi$, alors :
  - Si $\xi \geq P_{scat} + P_{n,2n} + P_{n,3n}$ alors il s'agit d'une réaction $(n, 3n)$.
  - Si $\xi \geq P_{scat} + P_{n,2n}$ alors il s'agit d'une réaction $(n, 2n)$.
  - Si $\xi \geq P_{scat}$ alors il s'agit d'une réaction de diffusion.

le groupe d'énergie seondaire g' après collision est dans ce cas déterminé par les sections de transfert $p_{g' \leftarrow g} = \frac{\Sigma_{s,0}^{g' \leftarrow g}}{\Sigma_{s,0}^{g}}$. La direction après choc est quant à elle déterminée suivant les lois d'anisotropie, obtenues à partir du développement en polynômes de Legendre des sections efficaces de transfert (voir chapitre 7). Le poids du neutron est alors multiplié par le nombre moyen de neutrons émis après diffusion, soit 2 pour une réaction $(n, 2n)$ et 3 pour une réaction $(n, 3n)$. L'histoire du neutron est ensuite poursuivie.

Si $\xi > P_s$, il s'agit d'une réaction d'absorption. Si le milieu considéré est fissile ($\Sigma_f^g \neq 0$), alors on modifie le poids du neutron suivant $\frac{\nu \Sigma_f^g}{\Sigma_a^g}$ et l'on enregistre l'indice de l'isotope ayant causé la fission et les coordonnées spatiales. Ces informations seront utilisées pour définir les propriétés du neutron source. Sinon le poids est mis à zéro. Dans tous les cas, l'histoire du neutron est terminé. Cette technique est une méthode de réduction de la variance utile pour les codes multigroupes (Lux et Koblinger, 1990). Elle est connue sous le nom de méthode de fission implicite, où la fission est prise en compte par augmentation du poids du neutron.

Lorsque la simulation de tous les neutrons de la génération est terminée, une estimation du k_{eff} peut être formulée. Celui-ci correspondra alors au rapport du nombre de neutrons produits par fission sur le nombre de neutrons présents initialement, i.e. au nombre de neutrons présents au début de la génération. La simulation se poursuit ainsi jusqu'à convergence statistique du k_{eff} ou si le nombre maximal d'itérations est atteint.

Il existe de nombreuses variantes à cet algorithme. La plupart des modifications apportées au cas analogue se basent sur des techniques de réduction de variance : capture implicite, splitting, roulette russe, etc. On décrira dans le chapitre 5 celles implémentées au sein du module `MC:`.

2.3.3 Méthode de delta-tracking

La procédure usuelle d'un algorithme de tracking Monte Carlo consiste à suivre le déplacement du neutron à travers la géométrie. Une fois que le libre parcours et la direction du neutron sont déterminés, on doit calculer la distance de la plus proche frontière physique dans la direction visée. Si le libre parcours est supérieur à cette distance, alors on déplace le neutron à la frontière pour rééchantillonner le libre parcours en utilisant la section efficace du matériau dans lequel rentre le neutron. Cette approche est connue sous le nom de procédure de « ray tracing » , mais ne doit pas être confondue avec les opérateurs de « tracking » des codes déterministes comme `NXT:` dans DRAGON. Il est alors nécessaire de résoudre en grande

quantité des équations algébriques afin de déterminer les points d'intersection d'une droite avec des surfaces de formes diverses.

Une technique alternative a été introduite pour la première fois dans les années 60 pour le code GEM (Woodcock, 1965). Dans cette méthode, le point de collision suivant peut être évalué sans faire intervenir les passages aux travers des frontières. La méthode est connue sous le nom de méthode de Woodcock, de pseudo-scattering, de fast-tracking, de hole tracking ou delta-tracking.

Il s'agit simplement d'une technique de rejet, une classe de méthodes bien connue des spécialistes en méthode Monte Carlo. Dans le cadre d'une méthode de rejet, on inverse indirectement une variable aléatoire de densité de probabilité f, généralement coûteuse voire impossible à inverser, en définissant une autre densité de probabilité h telle que $f \leq ch$, c borné et proche si possible de 1. L'algorithme de rejet procède alors par tirage dans h puis par test :

1. tirer X suivant $X = H^{-1}(\xi_1)$.
2. test : si $\xi_2 \geq \dfrac{f(X)}{ch(X)}$ alors accepter X, sinon retourner en (1).

L'efficacité de la méthode est directement reliée à c, c'est-à-dire que plus c est grand plus le nombre d'itérations risque d'être important. Dans le cas de la simulation de la distance avant collision, on définit une section efficace fictive à l'énergie considérée $\Sigma^{g,*}$ vérifiant $\Sigma^{g,*} \geq \Sigma^g_{t,i}$ pour tous les volumes i du problème considéré. Plusieurs possibilités existent pour définir $\Sigma^{g,*}$, cependant l'approche la plus efficace en transport neutronique consiste à prendre la section efficace majorante : $\Sigma^{g,*} = \max(\Sigma^g_{t,i})$. La densité de probabilité utilisée pour le libre parcours est alors $h = \Sigma^{g,*} \exp(-\Sigma^{g,*} s)$.

Une fois le libre parcours échantillonné suivant g, on déplace le neutron au point de collision dans le volume i. La collision est considérée « réelle » si $\xi \leq \dfrac{\Sigma^g_{t,i}}{\Sigma^{g,*}}$. Sinon, la collision est dite « virtuelle » et on boucle en tirant aléatoirement un nouveau libre parcours moyen. Evidemment, si un milieu possède une section efficace très importante vis-à-vis des autres, alors l'efficacité de la méthode de rejet décroît.

On démontre que cette approche est équivalente à homogénéiser fictivement toute la géométrie en introduisant une section efficace de pseudo-collision Σ_δ telle que $\Sigma^{g,*} = \Sigma^g_{t,i} + \Sigma^g_\delta$. Cette réaction est donc une « pseudo-diffusion » qui ne change ni la direction ni l'énergie du neutron (équivalent à un δ de Dirac).

La méthode de delta-tracking n'introduit aucun biais dans la simulation Monte Carlo et converge vers la même solution que dans le cas classique. La démonstration peut se trouver dans l'ouvrage de référence (Lux et Koblinger, 1990) ou dans la note (Arsenault et Le Tellier, 2008). Comme mentionné dans l'introduction, le code Monte Carlo avec tables de probabilité réalisé dans cette étude est basé sur la technique du delta-tracking. Il y a plusieurs justifications à ce choix :

- La méthode du delta-tracking simplifie grandement les coûts en terme de développement des routines reliées à la poursuite neutronique, en particulier pour le traitement des réseaux. Les fonctions d'interrogation de la géométrie se limitent alors à connaitre l'indice du milieu en fonction des coordonnées du neutron. Dans le cas conventionnel, il faut rajouter les méthodes de résolution des équations intervenant pour la recherche des frontières.
- La méthode du delta-tracking peut améliorer les temps de calcul en physique des réacteurs, sauf dans certaines configurations où on est en présence d'absorbants neutroniques localisés. On se base ici principalement sur les travaux faits dans le code SERPENT (Leppänen, 2010a) et à l'IRSN pour MORET (Forestier *et al.*, 2008). Il faut également préciser que certains codes comme MORET possèdent des capacités optimisées pour le traitement des réseaux. Dans ce cas, l'intérêt pour la méthode de Woodcock devient moindre.
- Enfin, on cherche essentiellement à démontrer la faisabilité d'un code Monte Carlo avec tables de probabilité. L'utilisation d'une méthode de rejet pour la marche aléatoire n'introduit aucune différence dans les résultats et les conclusions obtenues dans ce travail sont généralisables à n'importe quelle technique de tracking, à un certain degré d'efficacité près.

2.3.4 Estimateurs Monte Carlo

Il est possible de définir plusieurs estimateurs Monte Carlo des grandeurs neutroniques telles que le flux intégré, les taux de réactions ou le coefficient de multiplication effectif. En effet, l'algorithme Monte Carlo permet d'avoir accès à n'importe quelle quantité intégrale du type

$$R = \int_V \int_E f(\mathbf{r}, E)\phi(\mathbf{r}, E) d^3r dE \ , \tag{2.31}$$

avec $f(\mathbf{r}, E)$ fonction de réponse, e.g. si $f = 1$, on obtient le flux intégré, et si $f = \Sigma_\rho$, le taux de réaction ρ. La collection des résultats est très similaire à ce qui se fait dans le cas d'une expérience. L'idée est de compter les évènements réalisés dans l'espace d^3rdE comme si l'on y avait placé un détecteur fictif. Il est cependant possible de définir des estimateurs

implicites, c'est-à-dire où l'on enregistre des évènements n'ayant pas réellement lieu dans la simulation. A titre d'exemple, dans le cas d'un algorithme Monte Carlo analogue où les poids des neutrons sont tous égaux, on peut définir les compteurs d'évènements suivants :

- Nombre de chocs (collisions) : N^g_{chocs}
- Nombre d'absorption : N^g_{abs}
- Cumul des distances : $l = \sum_{k \in V,g} l_k$

Dans le cas de la méthode de delta-tracking, le cumul des distances n'est pas accessible et le nombre de chocs se divise en deux catégories : nombre total de collision (réelles et virtuelles), ou nombre de collisions réelles uniquement. On utilise les sections efficaces macroscopiques des différentes réactions pour en déduire l'estimateur flux associé :

- Flux collision : $\phi_{choc}(V,g) = \frac{N^g_{chocs}}{\Sigma^g_t}$
- Flux absorption : $\phi_{abs}(V,g) = \frac{N^g_{abs}}{\Sigma^g_a}$
- Flux corde : $\phi_l(V,g) = l = \sum_{k \in V,g} l_k$: (flux intégré : cumul des trajets des neutrons)

Dans le cas de la méthode de delta-tracking, le flux corde n'est pas accessible, et deux estimateurs du flux collision existent :

- Flux collision réel : $\phi_{choc}(V,g) = \frac{N^g_{chocs}}{\Sigma^g_t}$ où uniquement les collisions réelles sont considérées.
- Flux collision virtuel : $\phi_{choc}(V,g)^{g,*} = \frac{N^{g,*}_{chocs}}{\Sigma^{g,*}}$ avec $N^{g,*}_{chocs}$ le nombre de collisions total.

Similairement, on peut définir des estimateurs de k_{eff} pour un cycle donné :

- Estimateur collision k^{col}_{eff} :

$$k^{col}_{\text{eff}} = \sum_g \frac{1}{N} \sum_i \omega^g_i \left\{ \frac{\sum_k \nu \Sigma^g_{f,k}}{\sum_k \Sigma^g_{t,k}} \right\}$$

avec
- i les collisions où la fission est possible.
- k tous les isotopes présents sur les i sites de collision.
- N la source nominale pour le cycle n.
- ω^g_i le poids du neutron entrant en collision dans le groupe g.

Pour la méthode de Woodcock, il suffit de considérer les collisions réelles et virtuelles dans la relation précédente.

- estimateur absorption k_{eff}^{abs} :

$$k_{\text{eff}}^{abs} = \sum_g \frac{1}{N} \sum_i \omega_i^g \frac{\nu \Sigma_{f,k}^g}{\Sigma_{c,k}^g + \Sigma_{f,k}^g}$$

  avec
  - i les sites de capture analogue.
  - $\Sigma_{c,k}$ la section efficace de capture. Cet estimateur doit être défini autrement lorsque la capture est implicite.
- Estimateur corde (*track-length*) k_{eff}^{tl} :

$$k_{\text{eff}}^{tl} = \sum_g \frac{1}{N} \sum_i \omega_i d \sum_k \nu \Sigma_{f,k}^g$$

  avec
  - d distance parcourue par les neutrons.

  L'estimateur track-length n'est pas disponible dans le cas de la méthode de delta-tracking.

En théorie, tous les estimateurs sont statistiquement équivalents, c'est-à-dire qu'ils convergeront vers les mêmes valeurs. En pratique, il faut faire très attention aux types de problèmes que l'on cherche à résoudre. Pour le calcul de réacteurs, l'estimateur corde est souvent le plus efficace. L'estimateur collision est suffisant mais peut conduire à une sous-estimation du flux dans les zones de très faibles densités ou de vide. L'estimateur collision virtuelle, utilisé dans cette étude, ne présente cependant pas ce problème. En effet, des collisions virtuelles peuvent avoir lieu même si la section efficace du milieu est nulle. Par contre, l'estimateur collision sera inefficace pour les calculs de radioprotection où l'on cherche à déterminer une dose de radiation en une position précise.

2.3.5 Convergence de la méthode Monte Carlo

La méthode Monte Carlo repose principalement sur deux théorèmes mathématiques : la loi forte des grandes nombres ainsi que le théorème central limite. On associe à chaque cycle n une grandeur estimée X_n (k_{eff}, taux de réactions par exemple). La valeur finale échantillonnée s'obtient par :

$$\overline{X}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} X_n \tag{2.32}$$

On note $\mu = E[X]$, espérance de la variable aléatoire X. La loi forte des grands nombres indique que $\overline{X}_N$ converge vers μ pour N grand.

$$\forall \epsilon > 0, \qquad P(\lim_{N \to +\infty} |\overline{X}_N - \mu| > \epsilon) = 0 \tag{2.33}$$

Le théorème central limite assure que la somme d'un très grand nombre de variables aléatoires est elle-même une variable aléatoire, distribuée suivant une loi normale. Ainsi, si l'on répète le calcul Monte Carlo, $\overline{X}_N$ sera distribué normalement.

$$\lim_{N \to +\infty} P\{\mu - a\frac{\sigma}{\sqrt{N}} \leq \overline{X}_N \leq \mu + a\frac{\sigma}{\sqrt{N}}\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^{a} e^{-t^2} dt \tag{2.34}$$

Il est nécessaire d'obtenir une estimation de l'erreur statistique commise dans l'évaluation de $\overline{X}_N$. On démontre que si les $\overline{X}_n$ sont indépendants entre eux, alors

$$Var[\overline{X}_N] = \frac{Var[X]}{N} \tag{2.35}$$

Or $Var[X]$ est inconnu, on doit donc l'évaluer statistiquement. Un estimateur *non biaisé* est :

$$S_{\overline{X}_N} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^{N} X_n^2 - \overline{X}_N^2} \tag{2.36}$$

L'écart-type estimé pour $\overline{X}_N$ est donc :

$$\sigma(\overline{X}_N) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \left[\left(\sum_{n=1}^{N} X_n^2 \right) - N\overline{X}_N^2 \right]} \tag{2.37}$$

On remarque qu'il est suffisant de sauver les $\sum X_n$ et $\sum X_n^2$ afin d'estimer l'écart-type d'une variable aléatoire dans un code Monte Carlo, ce qui est assez pratique. On en déduit l'erreur relative statistique :

$$\bar{\epsilon}(\overline{X}_N) = \frac{\sigma(X_N)}{\overline{X}_N} \ . \tag{2.38}$$

On rappelle ensuite l'expression de densité de probabilité de la distribution normale de moyenne μ et d'écart-type σ :

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} \tag{2.39}$$

La fonction erreur est alors utile :

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \tag{2.40}$$

La fonction de distribution cumulative F associée à une distribution normale peut être exprimée en fonction de la fonction erreur, suivant :

$$F(x) = \frac{1}{2} \left[1 + \mathrm{erf}\left(\frac{x-\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right] \tag{2.41}$$

Les résultats distribués suivant une loi normale sont alors compris suivant un intervalle de confiance, relié à la fonction de distribution cumulative F. On définit $P(\mu - a\frac{\sigma}{N} < x < \mu + a\frac{\sigma}{N})$, probabilité que x soit a une certaine distance de la vraie valeur moyenne de la distribution, typiquement dans l'intervalle $[\mu - a\frac{\sigma}{N}, \mu + a\frac{\sigma}{N}]$. Cet intervalle de confiance peut s'exprimer suivant

$$P(\mu - a\frac{\sigma}{N} < x < \mu + a\frac{\sigma}{N}) = \mathrm{erf}\left(\frac{a}{\sqrt{2}}\right) \tag{2.42}$$

Les valeurs de la fonction de distribution cumulative doivent être évaluées numériquement. On utilise fréquemment trois valeurs pour a, conduisant à trois intervalles de confiance :
- Pour $a = 1$, la probabilité que la grandeur échantillonnée soit égale à la vraie valeur à 1 σ près ($\pm\sigma/\sqrt{N}$) est de 68 %.
- Pour $a = 2$, la probabilité que la grandeur échantillonnée soit égale à la vraie valeur à 2 σ près ($\pm 2\sigma/\sqrt{N}$) est de 95.4 %.
- Pour $a = 3$, la probabilité que la grandeur échantillonnée soit égale à la vraie valeur à 3 σ près ($\pm 3\sigma/\sqrt{N}$) est de 99.7 %.

L'erreur statistique décroit en $\frac{1}{\sqrt{N}}$, la méthode de Monte Carlo est donc une technique d'intégration convergeant à l'ordre $\mathcal{O}(n^{\frac{1}{2}})$. On retient en pratique que pour diminuer l'erreur statistique d'un facteur N, le nombre de simulations doit être multiplié par N^2. Il faut cependant comprendre que l'erreur *réelle* est indépendante de ces paramètres et est la conséquence de paramètres de modélisation erronés (sections efficaces, géométrie, etc...).

2.4 Schéma de calcul à vocation industrielle

Le calcul neutronique, intervenant en physique des réacteurs ou en calcul de criticité-sûreté, se révèle à ce jour trop coûteux pour être réalisé de manière systématique sur la géométrie entière considérée, et ceci quel que soit la méthode de résolution envisagée (détermi-

niste ou stochastique). Dans ces deux disciplines, l'évaluation des paramètres neutroniques est abordée suivant une méthodologie de calcul faisant intervenir plusieurs niveaux.

La première étape est similaire dans les deux cas, et correspond à un calcul dit de *réseau*. Un calcul de transport le plus détaillé possible suivant les variables espace et énergie est réalisé sur un élément représentatif de la géométrie globale, mais à l'échelle du libre parcours moyen. Dans le cas du calcul de réacteur, cet élément sera une cellule, un assemblage, voire un regroupement d'assemblages. Des conditions de reflexion ou de translation seront alors appliquées, simulant numériquement un réacteur pavé à l'infini par de telles cellules. Le calcul s'opère ici sans fuites de neutrons dans la cellule considérée. Afin de corriger cette approximation, un modèle de fuites peut être appliqué, ce qui sera décrit au chapitre 8 et qui mène au modèle du *mode fondamental*.

Le flux neutronique obtenu par résolution de l'équation de transport sur la cellule sert ensuite à la génération de sections efficaces homogénéisées et condensées, généralement à deux groupes d'énergie (rapide et thermique). Ce calcul est répété pour différentes plages de densités isotopiques dans la cellule, obtenues par couplage avec un outil fournissant l'évolution du combustible en fonction de la puissance dégagée. Ces sections efficaces générées par le code de réseau sont finalement utilisées dans un second niveau de calcul à l'échelle du cœur en entier, souvent basé sur un opérateur de transport dégradé tel que l'approximation de la diffusion.

Dans le cadre du calcul de criticité, le panel de configurations géométriques rencontré est beaucoup plus vaste, les configurations physico-chimiques diverses (milieux fissiles liquides, en poudres, etc.), le spectre neutronique plus étendu. Tout ceci conduit à un défi plus conséquent du point de vue de la neutronique. Cependant, l'objectif recherché est principalement le coefficient de multiplication effectif (k_{eff}) du milieu, indicateur macroscopique de l'état critique du milieu. Le risque de criticité intervient de manière significatif à toutes les étapes du cycle du combustible (aval ou amont), c'est-à-dire lors des étapes de fabrication, de transport, de stockage et de retraitement du combustible. Au cours du cycle, la matière fissile se retrouve ainsi sous différentes formes physiques et au sein de géométries variées. Une approche possible pour traiter ce genre de problématique est d'utiliser un schéma de calcul combinant calcul de réseau et code Monte Carlo multigroupe. Un calcul de réseau faisant intervenir une cellule 1D voire 2D est utilisé afin d'obtenir des sections efficaces macroscopiques, utilisées dans un calcul de criticité basé sur une méthode Monte Carlo multigroupe 3D, tel que représenté à la figure 6.1. Au niveau industriel, le calcul de réseau repose essentiellement sur l'utilisation

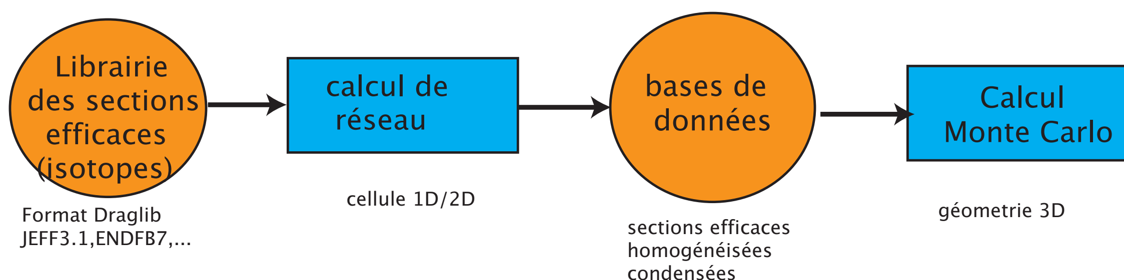


Figure 2.1 Chaîne de calcul en criticité

de codes déterministes, typiquement architecturés autour d'un solveur de flux multigroupe basé sur la méthode des probabilités de collision et/ou de la méthode des caractéristiques. Le papier (Martin *et al.*, 2009) détaille une étude réalisée à l'IRSN sur un couplage du code de réseau DRAGON avec le code Monte Carlo multigroupe MORET.

Le calcul de réseau opéré par de tels codes reposent sur une série d'approximations nécessaires à l'obtention de ces constantes par groupe (Hébert, 2007) :

- Auto-protection des résonances
  Les sections efficaces d'absorption de certains isotopes (majoritairement lourds, mais aussi de structure) présentent des pics de résonance, i.e. des probabilités d'interaction très grandes, fonctions de certaines valeurs discrètes de l'énergie des neutrons incidents. Le traitement de la variable énergie par des fonctions continues par morceaux d'intervalles relativement larges implique que dans une zone comprenant une ou plusieurs résonances, la section efficace moyenne sera très importante. Celle-ci, pondérée par un flux multigroupe ne représentant pas l'atténuation réelle du flux dans l'intervalle considéré, conduira à une large surévaluation des taux de réaction. Le terme « autoprotection des sections efficaces » prenant son origine du fait que la section efficace présentant un pic, multipliée par le flux neutronique réel présentant une dépression en sens opposée à celui de la section efficace, le taux de réaction (produit des deux termes) perdra cette variation rapide suivant la variable énergie. Deux approches sont alors possibles pour mieux prendre en compte ce phénomène : soit l'on cherche à discrétiser plus finement le maillage énergétique afin que les résonances larges soient résolues de par la structure même du groupe, soit l'on cherche à remplacer le flux de pondération par un flux plus judicieux, obtenu dans une situation simplifiée équivalente. En pratique, ces deux approches sont supplétives : les maillages énergétiques mis en place en physique des réacteurs comprennent généralement une partie possédant une représentation assez fine

en énergie, et un domaine où il est nécessaire d'appliquer un modèle d'auto-protection.

- Calcul du flux multigroupe
  L'équation de transport sous la forme multigroupe est résolue, avec ou sans modèle de fuites.
- Homogénéisation et condensation des taux de réactions
  On procède par pondération des sections efficaces multigroupes par le flux obtenu précédemment. Une étape d'équivalence peut être rajoutée à ce niveau afin de forcer la conservation des taux de réaction, en appliquant par exemple une procédure de superhomogénéisation. Les grandeurs nécessaires aux codes de diffusion ou nodaux (coefficients de diffusion, facteurs de discontinuité, etc.) peuvent être aussi calculées.

CHAPITRE 3

MÉTHODE DES SOUS-GROUPES

3.1 Mise en contexte

Afin de tenir compte du phénomène d'auto-protection des résonances dans le cadre d'une représentation multigroupe, l'approche la plus courante est de calculer des sections efficaces dites *effectives*. De nombreuses techniques ont été introduites pour déterminer ces sections efficaces auto-protégées, la plupart reposant sur la méthode d'équivalence de Livolant (Livolant et Jeanpierre, 1974). Il existe cependant deux méthodes pouvant éliminer la problématique de l'auto-protection dans le cadre de l'approximation multigroupe. La première consiste à simplement augmenter le nombre de groupes, de telle sorte que l'intervalle en énergie devienne faible comparé à la largeur des résonances. Cette approche est néanmoins hasardeuse, car elle conduira en pratique à plusieurs dizaine de milliers de groupes, qui convergeront nécessairement vers les données ponctuelles des évaluations. De plus, cette méthode faillira dans la partie non résolue, où la position précise des résonances est inconnue. Elle n'a donc aucun avantage en comparaison d'une méthode à énergie continue.

Il est alors intéressant de remarquer que cette méthode a simplement comme objectif de faire diminuer le domaine de variation de la section efficace totale dans chaque groupe. Ceci étant peu réalisable par subdivision de l'intervalle en énergie, il est naturel de considérer plutôt la subdivision de la section efficace totale elle-même à l'intérieur de chaque groupe. Cette technique est apparue dans les années 1970 dans les travaux de Nikolaev sous le nom de méthode des sous-groupes (Nikolaev *et al.*, 1970, 1972). La méthode des tables de probabilité de Levitt (Levitt, 1972) et la méthode multibande de Cullen (Cullen, 1974) sont équivalentes à l'approche de Nikolaev (Nikolaev, 1976). Nous avons gardé dans ce document la terminologie introduite par Nikolaev et ferons référence par méthode des sous-groupes à la technique impliquant la subdivision de la section efficace totale en bandes, ou niveaux, dans chaque groupe d'énergie. Ceci n'est absolument pas équivalent à subdiviser l'intervalle en énergie dans chaque groupe. En effet, les équations des sous-groupes permettent aux neutrons d'intéragir avec plusieurs valeurs de sections efficaces dans chaque groupe d'énergie, alors que dans le cas multigroupe, une seule valeur de section efficace totale est considérée. Par ailleurs, la dépendance spatiale des sections efficaces est directement prise en compte dans le cadre de la méthode des sous-groupes, ce qui permet de calculer des sections efficaces multigroupes

spatialement auto-protégées. La méthode des sous-groupes est donc largement utilisée dans le cadre des méthodes d'auto-protection des résonances, notamment celles implémentées au sein du module `USS:` du code de réseau DRAGON. Une série d'approximations (découplage du flux, modèle de ralentissement, source isotrope) combinées à la méthode des sous-groupes sont utilisées pour obtenir les sections efficaces auto-protégées.

Dans notre travail, la méthode des sous-groupes est utilisée directement comme solveur de l'équation de transport. Ce chapitre sera donc composé de deux parties : dans un premier temps nous présenterons le formalisme des tables de probabilité comme méthode de représentation de la variable énergie, utiles pour obtenir les équations des sous-groupes. Enfin, nous présenterons l'obtention de l'équation de transport sous sa forme multibande, i.e., avec sous-groupes.

3.2 Tables de probabilité : formalisme mathématique

Dans le cadre de la méthode des sous-groupes, les sections efficaces microscopiques sont remplacées par leurs densités de probabilité associées. Chaque densité de probabilité est ensuite discrétisée pour obtenir des paramètres définissant des quadratures, dénommées tables de probabilité. Celles-ci sont ensuite utilisées lors de la résolution de l'équation du flux dans chaque sous-groupe. Il est donc légitime de visualiser les tables de probabilité comme une technique d'intégration de la variable énergie. L'approche par sous-groupes a évolué suivant les différentes améliorations possibles concernant la détermination des tables de probabilité. Initialement, le terme de table de probabilité introduit par Levitt décrit une quadrature pour laquelle les points de base sont fixés à priori. Par la suite, la méthode des sous-groupes de Nikolaev et multibandes de Cullen ont fait appels à des techniques déterminant simultanément points de base et poids associés.

L'approche proposée par Ribon (Ribon et Maillard, 1986; Hébert et Coste, 2002) est une généralisation des techniques précédentes : le calcul d'une table de probabilité est relié au problème des moments et conduit à des tables de probabilité équivalentes à des quadratures de Gauss. Cette technique a été retenue dans notre travail, de par son importante stabilité numérique, vis-à-vis des techniques RMS notamment. Nous présenterons au chapitre 4 la méthode des moments pour le calcul des tables de probabilité.

La représentation par tables de probabilité est handicapée par l'approximation de non-corrélation du terme de source et de collision. Ce problème intervient quand l'intervalle

en léthargie d'un groupe est relativement large comparé au gain moyen en léthargie du neutron : le terme de source devient corrélé à la valeur de la section efficace totale. Ceci pose un problème essentiellement dans la partie épithermique du spectre, d'où une large utilisation de la méthode de sous-groupes dans le cadre de réacteurs à spectre rapide. Dans le cas de réacteurs thermiques, il est nécessaire d'introduire une corrélation au niveau du calcul des tables de probabilité pour l'opérateur de ralentissement dans le domaine énergétique résolu (Hébert, 2005), ou plus simplement d'augmenter le nombre de groupes dans ce domaine de telle sorte que la corrélation entre la source et la valeur de la section efficace totale disparaisse (Hébert, 2008). En effet, quand le maillage est raffiné, la contribution du terme de diffusion à l'intérieur du même groupe (self-scattering) vis-à-vis de la section efficace totale diminue. L'opérateur de ralentissement agit en effet sur l'intervalle $[u-\epsilon, u]$ et l'intersection de cet intervalle avec le groupe g diminue aussi, limitant l'effet de corrélation. C'est cette approche qui a été retenue dans ce travail, conduisant à l'utilisation de maillages énergétiques à 295 ou 361 groupes basés sur un rafinement du maillage SHEM (Hfaiedh et Santamarina, 2005). Les tables de probabilité pour l'opérateur de ralentissement introduit dans (Hébert, 2005) pour le maillage XMAS à 172 groupes, permettant la prise en compte des corrélations entre les points de base de la section de diffusion, ne seront donc pas utilisées dans ce travail.

3.2.1 Table de probabilité pour une section efficace totale

Formalisme général

On considère la densité de probabilité de la section efficace $\Pi(\sigma)$, telle que $\Pi(\sigma)d\sigma$ représente la probabilité pour la section efficace microscopique σ de l'isotope résonnant d'avoir une valeur comprise entre σ et $\sigma \pm d\sigma$. La densité de probabilité $\Pi(\sigma)$ est normalisée :

$$\int_0^{max(\sigma)} d\sigma \Pi(\sigma) = 1 \ . \tag{3.1}$$

L'objectif est d'approcher la densité de probabilité $\Pi(\sigma)$ par une série de K distributions de Dirac centrées sur des valeurs discrètes de la section efficace microscopique σ_k pour l'isotope résonnant. Chaque niveau discret sera appelé sous-groupe et sera caractérisé par un poids discret ω_k. Ceci est équivalent à subdiviser la plage de valeurs que peut prendre la section efficace microscopique σ en K intervalles $[S_{k-1}, S_k]$ et affecter un point de base σ_k à chaque bande. On approxime alors $\Pi(\sigma)$ par :

$$\Pi(\sigma) \simeq \sum_{k=1}^{K} \delta(\sigma - \sigma_k)\omega_k, \qquad \text{avec} \qquad \sum_{k=1}^{K} \omega_k = 1 \tag{3.2}$$

$\Pi_k = \omega_k$ sera alors donné par

$$\omega_k = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} du\delta(\sigma(u), (\sigma_k) \ . \tag{3.3}$$

Soit, de manière équivalente, en remplaçant l'intégrale de Riemman en léthargie par une intégrale de Lebesgue équivalente en σ :

$$\omega_k = \int_{S_{k-1}}^{S_k} d\sigma \Pi(\sigma) \tag{3.4}$$

avec $\Delta u_g = u_g - u_{g-1}$. La densité de probabilité $\Pi(\sigma)$ est inversement proportionnelle à $\frac{d\sigma}{du}$, ainsi elle présentera un comportement asymptotique sous forme de pics à chaque résonance pour lesquels $\frac{d\sigma}{du} = 0$. On approxime ensuite la densité de probabilité $\Pi(\sigma)$ par une série de K distributions de Dirac, centrées aux valeurs discrètes σ_k de la section efficace totale. Chaque niveau discret k est appelé *sous-groupe* ou *bande* et est caractérisé par un poids ω_k. On introduit alors l'espérance d'une fonction arbitraire f de la section efficace totale $E\left[f(\sigma)\right]$:

$$E\left[f(\sigma)\right] = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} du f[\sigma(u)] = \int_{min(\sigma)}^{max(\sigma)} d\sigma \Pi(\sigma) f(\sigma) \tag{3.5}$$

On obtient dès lors la discrétisation suivante :

$$E\left[f(\sigma)\right] = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} du f[\sigma(u)] \simeq \sum_{k=1}^{K} \omega_k f(\sigma_k) \tag{3.6}$$

La quadrature ainsi obtenue $\{\omega_k, \sigma_k\}_{k \in [1,K]}$ pour le groupe g est appelée table de probabilité pour la variable σ. La relation 3.6 illustre le fait qu'une table de probabilité est mathématiquement équivalente à une table de quadrature pour la variable énergie.

Exemples

Un exemple de table de probabilité pour la section efficace microscopique totale est affichée à la figure 3.1. Dans ce cas, la section efficace est divisée en 5 sous-groupes, correspondant à une table de probabilité d'ordre 5. L'évolution de l'ordre des tables de probabilité en fonction de l'énergie est donné aux figures 3.2 et 3.3 pour les isotopes ^{238}U et ZrO, avec le maillage multigroupe SHEM à 295 groupes. Comme attendu, le nombre de sous-groupes augmente en fonction du nombre et de la taille des résonances dans chaque groupe. Le cas où la table de probabilité est d'ordre 1 fait simplement correspondre le sous-groupe avec le groupe lui-même.

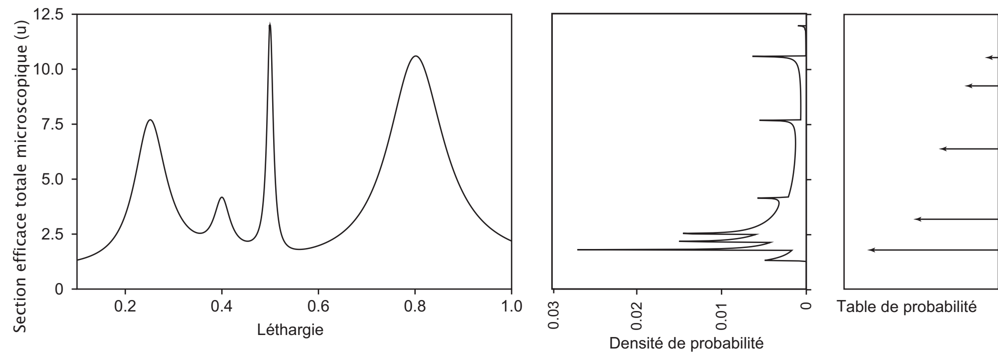


Figure 3.1 Exemple de table de probabilité

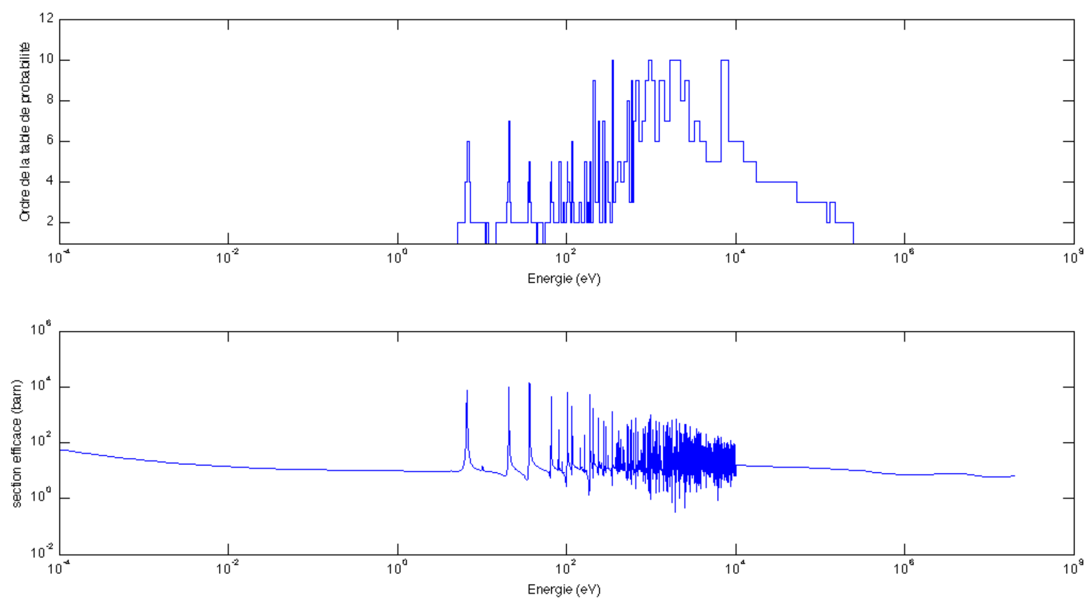


Figure 3.2 Nombre de sous-groupes en fonction de l'énergie pour ^{238}U

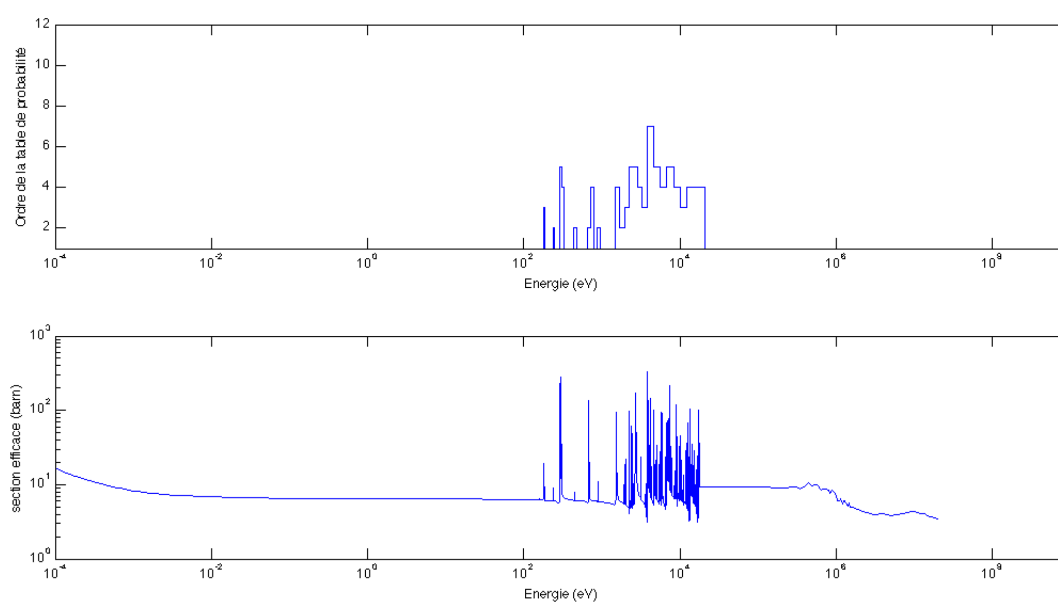


Figure 3.3 Nombre de sous-groupes en fonction de l'énergie pour ZrO

3.2.2 Table de probabilité pour une section efficace partielle

Il est important de noter que les réactions partielles ρ interviennent uniquement linéairement en neutronique, typiquement dans des intégrales du type

$$I = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} du f[\sigma_t(u)] \sigma_\rho(u) \ , \tag{3.7}$$

qui peuvent encore s'exprimer sous la forme

$$I = \int_0^{max(\sigma_t)} d\sigma_t f(\sigma_t) \int_0^{max(\sigma_\rho)} d\sigma_\rho \sigma_\rho \Pi(\sigma_t, \sigma_\rho) \ , \tag{3.8}$$

où la densité de probabilité conjointe $\Pi(\sigma_t, \sigma_\rho)$ est telle que $\Pi(\sigma_t, \sigma_\rho) d\sigma_\rho$ est la probabilité que la section efficace relative à la réaction ρ ait une valeur entre σ_ρ et $\sigma_\rho + d\sigma_\rho$ tandis que la section efficace microscopique totale ait une valeur entre σ_t et $\sigma_t + d\sigma_t$. On note

$$E\left[\sigma_\rho | \sigma_t\right] = \int_0^{max(\sigma_\rho)} d\sigma_\rho \sigma_\rho \frac{\Pi(\sigma_\rho, \sigma_t)}{\Pi(\sigma_t)} \ ,$$

L'équation 3.8 devient :

$$I = \int_0^{max(\sigma_t)} d\sigma_t \Pi(\sigma_t) f(\sigma_t) E\left[\sigma_\rho | \sigma_t\right] \simeq \sum_{k=1}^{K} \omega_k \sigma_{\rho,k} f(\sigma_k) \ . \tag{3.9}$$

On définit ainsi $\sigma_{\rho,k}$ point de base pour la section efficace partielle ρ.

3.2.3 Matrice des poids corrélés entre deux isotopes

Il est possible de définir des poids corrélés entre deux isotopes a et b, σ^a et σ^b, intervenant lors de la prise en compte de l'effet de recouvrement entre deux résonances de deux isotopes résonnants.

On introduit alors une densité de probabilité conjointe $\Pi(\sigma^a, \sigma^b)$ telle que $\Pi(\sigma^a, \sigma^b) d\sigma^a d\sigma^b$:

- correspond à la probabilité pour la section efficace totale de l'isotope a d'avoir une valeur comprise entre σ^a et $\sigma^a + d\sigma^a$ dans le groupe g,
- correspond à la probabilité pour la section efficace totale de l'isotope b d'avoir une valeur comprise entre σ^b et $\sigma^b + d\sigma^b$ dans le groupe g.
- $$\int_0^{max(\sigma^a)} d\sigma^a \int_0^{max(\sigma^b)} d\sigma^b \Pi(\sigma^a, \sigma^b) = 1 \tag{3.10}$$

En utilisant cette définition, l'espérance de toute fonction $u \to f[\sigma^a(u), \sigma^b(u)]$ peut s'écrire suivant une intégrale de Lebesgue :

$$E(f[\sigma^a, \sigma^b]) = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} du f[\sigma^a(u), \sigma^b(u)] = \int_0^{max(\sigma^a)} d\sigma^a \int_0^{max(\sigma^b)} d\sigma^b \Pi(\sigma^a, \sigma^b) f(\sigma^a, \sigma^b) \ . \tag{3.11}$$

La densité de probabilité conjointe peut s'écrire sous la forme d'une matrice dont les termes $\omega_{k,l}^{ab}$ sont définis par :

$$\Pi(\sigma^a, \sigma^b) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\ell=1}^{L} \delta(\sigma^a - \sigma_k^a)\delta(\sigma^b - \sigma_\ell^b)\omega_{k,\ell}^{ab} \ , \tag{3.12}$$

et on obtient alors la discrétisation :

$$\frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} du f[\sigma^a(u), \sigma^b(u)] = \sum_{k=1}^{K} \sum_{\ell=1}^{L} \delta(\sigma^a - \sigma_k^a)\delta(\sigma^b - \sigma_\ell^b)\omega_{k,\ell}^{ab} f[\sigma_k^a, \sigma_\ell^b] \ . \tag{3.13}$$

La matrice des poids corrélés est normalisée de telle manière que :

$$\sum_{k=1}^{K} \omega_{k,\ell}^{ab} = \omega_\ell^b \ , \tag{3.14}$$

et :

$$\sum_{\ell=1}^{L} \omega_{k,\ell}^{ab} = \omega_k^a \ . \tag{3.15}$$

Les tables de probabilité obtenues sont dites « 2D » et permettent de déterminer la valeur de la section efficace de l'isotope a connaissant celle de l'isotope b. Ceci s'exprime mathématiquement suivant :

$$P(\sigma_k^a | \sigma_\ell^b) = \frac{\omega_{k,\ell}^{ab}}{\omega_\ell^b} \ . \tag{3.16}$$

Lorsque les effets de corrélations disparaissent, $\omega_{k,\ell}^{ab} = \omega_k^a \omega_\ell^b$ et l'on retombe sur une table de probabilité 1D.

3.2.4 Tables de probabilité pour l'opérateur de ralentissement

Il est également possible d'introduire une discrétisation de l'opérateur de ralentissement élastique. Celui-ci peut s'écrire sous la forme standard, avec $\sigma \to f(\sigma)$ et $\sigma \to g(\sigma)$ fonctions

de la section efficace microscopique totale :

$$\frac{1}{\Delta u_g}\int_{u_{g-1}}^{u_g} du \int_{u-\epsilon}^{u} du' e^{u'-u} f[\sigma(u)]g[\sigma(u')] = \int_0^{max(\sigma)} d\sigma \int_0^{max(\sigma')} d\sigma' \Pi_s(\sigma,\sigma') f(\sigma) g(\sigma') \quad (3.17)$$

La densité de probabilité conjointe peut alors être évaluée par une quadrature similaire à celle introduite au paragraphe précédent :

$$\Pi_s(\sigma,\sigma') = \sum_{k=1}^{K}\sum_{\ell=1}^{K} \mathcal{W}_{k,\ell}\delta(\sigma-\sigma_k)\delta(\sigma'-\sigma_\ell) \quad (3.18)$$

D'où une discrétisation suivante pour l'opérateur de ralentissement élastique :

$$\frac{1}{\Delta u_g}\int_{u_{g-1}}^{u_g} du \int_{u-\epsilon}^{u} du' e^{u'-u} f[\sigma(u)]g[\sigma(u')] = \sum_{k=1}^{K}\sum_{\ell=1}^{K} \mathcal{W}_{k,\ell} f(\sigma_k) g(\sigma_\ell) \quad (3.19)$$

avec :

$$\sum_{k=1}^{K} \mathcal{W}_{k,\ell} = \omega_\ell \quad (3.20)$$

et :

$$\sum_{\ell=1}^{K} \mathcal{W}_{k,\ell} = \omega_k \quad (3.21)$$

Ces deux conditions sont cependant mathématiquement incohérentes. En effet, la borne inférieure de la deuxième intégrale dans le terme de gauche commence à $u-\epsilon$, ce qui implique que $\sigma(u')$ peut prendre des valeurs dans le groupe $g-1$. Dans le terme de droite, les points de base sont quand à eux définis uniquement dans le groupe g. En pratique, il sera donc nécessaire de relaxer une de ces deux conditions de normalisation. La matrice des poids corrélés donne la probabilité de ralentissement du sous-groupe k au sous-groupe ℓ suivant

$$P^{k\leftarrow\ell} = \frac{\mathcal{W}_{k,\ell}}{\omega_k} \ . \quad (3.22)$$

3.2.5 Expression générale du terme de transfert

Il est possible d'exprimer de manière générale le terme de source par diffusion dans le formalisme des sous-groupes, suivant la relation

$$\langle Q((r),(\Omega),u)\rangle_{g,k} = \sum_{g'=1}^{G}\sum_{k'=1}^{K'}\sum_{\ell=1}^{L}\frac{2\ell+1}{4\pi}\,\frac{\mathcal{W}_\ell^{\{g,k\}\leftarrow\{g',k'\}}}{\omega_k}\,\Sigma_{s,g',k'}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\mathcal{R}_\ell^m((\Omega))\,\phi_{\ell,g',k'}^m((r)) \tag{3.23}$$

avec

$$P_\ell^{\{g,k\}\leftarrow\{g',k'\}} = \frac{\mathcal{W}_\ell^{\{g,k\}\leftarrow\{g',k'\}}}{\omega_k\,\omega_{k'}} \tag{3.24}$$

$P_0^{\{g,k\}\leftarrow\{g',k'\}}$ représente la probabilité de transfert d'un couple (sous-groupe, groupe) à un autre. La difficulté réside dans l'évaluation de ce terme. Plusieurs approximations pour l'opérateur de ralentissement ont été introduites dans la littérature. En particulier, l'approximation "Ribon extended" s'écrit

$$P^{\{g,k\}\leftarrow\{g',k'\}} = \frac{\mathcal{W}_{k,k'}}{\omega_k\,\omega_{k'}}\,\delta_{g,g'} \tag{3.25}$$

avec $\delta_{g,g'}$ fonction de Kronecker et $\mathcal{W}_{k,k'}$ la matrice des poids corrélées calculée suivant la méthodologie introduite à la section 2.C de (Hébert, 2005). L'approximation ST de la méthode "subgroup projection method" est alors

$$P^{\{g,k\}\leftarrow\{g',k'\}} = \delta_{g,g'} \tag{3.26}$$

qui est une simplification de la précédente, obtenue en posant $\mathcal{W}_{k,k'} = \omega_k\,\omega_{k'}$, et présentée dans (Hébert, 2008). Dans cette étude, une nouvelle approximation a été introduite, typiquement

$$P^{\{g,k\}\leftarrow\{g',k'\}} = P^{\{g\}\leftarrow\{g',k'\}} \tag{3.27}$$

avec

$$P^{\{g\}\leftarrow\{g',k'\}} = \frac{\Sigma_{s,0}^{\{g\}\leftarrow\{g',k'\}}}{\Sigma_{s,g',k',0}} \tag{3.28}$$

Les sections efficaces de transfert du sous-groupe k' du groupe g' vers le groupe g sont traitées comme des réactions partielles dans le groupe g'. L'information sur le sous-groupe d'arrivée n'est cependant pas disponible. Il est intéressant de remarquer que s'il n'y a pas de transfert du groupe g' vers g, il n'y aura pas non plus de transfert du sous-groupe k' du groupe g' vers le sous-groupe k du groupe g.

3.3 L'équation de transport dans le cadre des sous-groupes

3.3.1 Obtention de l'équation de transport multibande

Après avoir défini les tables de probabilité pour les sections efficaces, il est possible de reformuler l'équation de transport dans le formalisme des sous-groupes. L'équation de transport dans un milieu multiplicateur, tel que résolue en calcul des réacteurs ou de criticité s'exprime par :

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) + \Sigma_t(\mathbf{r}, u)\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) = Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) \ , \tag{3.29}$$

Dans le cas d'un milieu à l'état stationnaire, le terme source peut s'écrire :

$$Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) = \int_0^\infty du' \int_{4\pi} d^2\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}', u \leftarrow u')\phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', u') + Q^{fiss}(\mathbf{r}, u) \ . \tag{3.30}$$

Le terme de fission, considérée isotrope, s'écrit

$$Q^{fiss}(\mathbf{r}, u) = \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^{J^{fiss}} \chi_j(u) \int_0^\infty du' \nu\Sigma_{f,j}(\mathbf{r}, u')\phi(\mathbf{r}, u') \tag{3.31}$$

L'approche classique est de développer la section efficace de diffusion en terme de polynômes de Legendre :

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}', u \leftarrow u') = \sum_{\ell=1}^{L} \frac{2\ell + 1}{2} \Sigma_{s,\ell}(\mathbf{r}, u \leftarrow u')P_\ell(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}') \tag{3.32}$$

On note $\mu = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}'$ cosinus de l'angle de diffusion :

$$\Sigma_{s,\ell}(u \leftarrow u') = \int_{-1}^{1} d\mu \Sigma_s(u \leftarrow u', \mu)P_\ell(\mu) \tag{3.33}$$

Le théorème d'addition des harmoniques sphériques permet d'écrire le terme de source par diffusion en fonction des moments harmoniques sphériques du flux, ce qui conduit à l'expression suivante pour le terme de source au complet :

$$Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) = \int_0^\infty du' \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell + 1}{4\pi} \Sigma_{s,\ell}(\mathbf{r}, u \leftarrow u') \sum_{m=-\ell}^{\ell} \mathcal{R}_\ell^m(\mathbf{\Omega})\phi_\ell^m(\mathbf{r}, u') + \frac{1}{4\pi k_{eff}} Q^{fiss}(\mathbf{r}, u) \ , \tag{3.34}$$

avec

$$\phi_\ell^m(\mathbf{r}, u') = \int_{4\pi} d^2\Omega \mathcal{R}_\ell^m \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u') \ . \tag{3.35}$$

Dans un premier temps, l'approche est similaire à l'obtention de la forme multigroupe de l'équation de transport. On moyenne l'équation 3.29 sur $[u_{g-1}, u_g]$:

$$\langle \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) \rangle_g + \langle \Sigma_t(\mathbf{r}, u) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) \rangle_g = \langle Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) \rangle_g \tag{3.36}$$

On remplace ensuite les intégrales de Riemman en u par des intégrales de Lebesgue équivalentes en σ sur l'intervalle $[\sigma_{min}, \sigma_{max}]$:

$$\langle f[\sigma(u)] \rangle_g = \int_{\sigma_{min}}^{\sigma_{max}} d\sigma \Pi(\sigma) f(\sigma). \tag{3.37}$$

On voit que la difficulté va résider dans l'expression du terme source, en particulier pour la représentation de la section efficace de transfert. Afin de simplifier les notations, on pose $\phi_{g,k}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ le flux angulaire du sous-groupe k du groupe g. Si on applique la formule de quadrature définie à l'équation 3.6, le terme de fuite et de collision principal dans l'équation de transport deviennent :

$$\langle \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) \rangle_g = \sum_{k=1}^{K} \omega_k \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi_{g,k}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \tag{3.38}$$

$$\langle \Sigma_t(\mathbf{r}, u) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) \rangle_g = \sum_{k=1}^{K} \omega_k \Sigma_{g,k} \phi_{g,k}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \tag{3.39}$$

On note $P_\ell^{\{g,k\} \leftarrow \{g',k'\}}$ section efficace macroscopique de transfert développée à l'ordre de Legendre ℓ du sous-groupe k' du groupe g' vers le sous-groupe k du groupe g. Le terme de source par diffusion devient :

$$\langle Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, u) \rangle_g = \sum_{k=1}^{K} \omega_k \sum_{g'=1}^{G} \sum_{k'=1}^{K'} \omega_{k'} \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell^{\{g,k\} \leftarrow \{g',k'\}} \Sigma_{s,g',k'} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \mathcal{R}_\ell^m(\mathbf{\Omega}) \phi_{\ell,g',k'}^m(\mathbf{r}) \tag{3.40}$$

Le terme de fission s'écrivant simplement :

$$\langle Q^{fiss}(\mathbf{r}, u) \rangle_g = \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^{J^{fiss}} \chi_{j,g} \sum_{g'=1}^{G} \sum_{k'=1}^{K'} \omega_{k'} \nu \Sigma_{f,j,g',k'} \phi_{g',k'}(\mathbf{r}) \tag{3.41}$$

Le spectre de fission χ est constant par groupe, c'est-à-dire indépendant du sous-groupe. On obtient finalement l'équation de transport dans sa forme multibande, valide dans un

sous-groupe k d'un groupe g :

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi_{g,k}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + \Sigma_{g,k} \phi_{g,k}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \sum_{g'=1}^{G} \sum_{k'=1}^{K'} \omega_{k'} \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell^{\{g,k\} \leftarrow \{g',k'\}} \Sigma_{s,g',k'} \times \tag{3.42}$$
$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} \mathcal{R}_\ell^m(\mathbf{\Omega}) \phi_{\ell,g',k'}^m(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi k_{eff}} \sum_{j=1}^{J^{fiss}} \chi_{j,g} \sum_{g'=1}^{G} \sum_{k'=1}^{K'} \omega_{k'} \nu \Sigma_{f,j,g',k'} \phi_{g',k'}(\mathbf{r}) \ ,$$

Plusieurs aspects doivent être mis en relief ici :

- Les sections efficaces totales définies par mélange ne dépendent pas *stricto sensu* d'un sous-groupe k. Ce sont les sections efficaces microscopiques qui sont dépendantes d'un sous-groupe donné, celui-ci pouvant très bien être différents entre plusieurs isotopes. On aura alors : $\Sigma_{g,k} = \sum_{i \in mat} N_i \sigma_{i,g,k}$, k le sous-groupe de l'isotope i dans le groupe g. Par linéarité, la formulation précédente reste correcte, mais il sera nécessaire de p réciser les conditions aux interfaces physiques dans le cadre de la méthode des sous-groupes. En particulier, le sous-groupe pour un même isotope présent dans deux milieux physiques contigus devra être le même.
- Les paramètres multigroupes peuvent s'obtenir facilement par sommation des grandeurs des sous-groupes. En particulier, le flux multigroupe s'obtient par sommation des flux multibandes :
$$\phi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \sum_{k=1}^{K} \omega_k \phi_{g,k}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \tag{3.43}$$
Le cas trivial d'une table de probabilité d'ordre 1 conduit à un sous-groupe coincidant avec le cas multigroupe. En ce sens, la méthode multibande peut être vue comme une extention de l'approche multigroupe, et un code résolvant l'équation de transport sous la forme multigroupe peut en pratique être modifié aisément pour résoudre l'équation de transport en format multibande.

3.3.2 Conditions aux frontières

Le traitement des conditions aux frontières dans le cadre de la méthode des sous-groupes ne présente aucune différence vis-à-vis du cas multigroupe. Les conditions limites rencontrées dans le cadre du calcul neutronique en physique des réacteurs sont principalement du type ≪ conditions d'albédo ≫ : le flux sortant est relié au flux réentrant par un facteur β.

$$\phi_{g,k}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \beta \phi_{g,k}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') \qquad \text{avec} \qquad \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}) < 0 \ . \tag{3.44}$$

Le cas $\beta = 0$ correspond à une condition de vide, et $\beta = 1$ à une condition de reflexion. Le cas de la réflexion spéculaire s'obtient en fixant de plus

$$\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}) = -\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}) \qquad \text{avec} \qquad (\mathbf{\Omega}' \times \mathbf{\Omega}) \cdot \mathbf{N}(\mathbf{r}) = 0 \ . \tag{3.45}$$

Le cas périodique pour un réseau de pas $\Delta\mathbf{r}$ s'écrit aussi

$$\phi_{g,k}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \phi_{g,k}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \ . \tag{3.46}$$

CHAPITRE 4

MÉTHODE DES MOMENTS

Comme montré précédemment, la résolution de l'équation de transport par la méthode des sous-groupes nécessite la connaissance des tables de probabilité suivantes :

- $\{\sigma_k, \omega_k\}_{k\in[1,K]}$ pour une section efficace quelconque ;
- $\{\sigma_{\rho,k}, \omega_k\}_{k\in[1,K]}$ pour une section efficace partielle ;
- optionnellement $\left\{\left(\sigma_k^a, \sigma_\ell^b\right), \left(\omega_{k,\ell}^{ab}\right)\right\}_{k\in[1,K],\ell\in[1,L]}$ pour la prise en compte des corrélations entre résonances de deux isotopes.

La première méthode référencée dans la littérature est connue sous le nom de « méthode multibande équiprobable ». Levitt (Levitt, 1972) et Cullen (Cullen, 1974) procèdent par découpage en N bandes régulières de l'intervalle $[\sigma_{t,min}, \sigma_{t,max}]$, puis par détermination de la probabilité de présence de σ_t dans chacune des ces bandes. Les points de base des tables de probabilité sont donc établis à priori. Cette méthode a été ensuite abandonnée au profit de méthodes permettant le calcul simultané des points de base et des poids associés.

Deux techniques différentes ont émergé : l'école russe (Nikolaev, 1976) propose de considérer les tables de probabilité comme des quadratures respectant des valeurs établies de sections efficaces effectives. Les américains proposeront simultanément la même approche (Cullen, 1977). Encore actuellement, différents codes de réseau utilisent des méthodes de calcul de table de probabilités dérivées de ce formalisme, que l'on identifiera par la suite *tables de probabilité physiques* pour les sections efficaces.

Enfin, les travaux de P. Ribon (Ribon et Maillard, 1986) en France ont relié la théorie des calculs de tables de probabilité aux problèmes des moments. Les liens mathématiques rigoureux existant entre les problèmes des moments, les polynômes orthogonaux et les quadratures de Gauss-Jacobi permettent de considérer ce formalisme comme le plus abouti à ce jour. Les tables de probabilité ainsi obtenues sont dites *mathématiques* et constituent la base du code de traitement des évaluations nucléaires CALENDF (Sublet *et al.*, 2002).

Ces tables de probabilité sont utilisées dans différents modèles d'autoprotection, notamment au sein des codes APOLLO2 (Hébert et Coste, 2002) et ECCO (Grimstone *et al.*, 1990). En ce qui concerne le code DRAGON, différents modèles d'autoprotection utilisent les tables de probabilité CALENDF pour la section efficace totale, typiquement les modèles dits de

Ribon étendue (Hébert, 2005) et la méthode des sous-groupes projetés (Hébert, 2008). Les points de base pour les réactions partielles sont ensuite calculées à partir d'une approche RMS (Root Mean Square) visant à conserver les taux de réactions déterminés dans NJOY pour certaines valeurs de dilutions. Il a été démontré que cette méthode conduit à des calculs d'autoprotection très précis, en permettant notamment la prise en compte des effets d'autoprotection spatiale et de recouvrement. Néanmoins, une méthodologie purement CALENDF s'est révélée nécessaire dans le cas du module Monte Carlo avec tables de probabilité, comme nous le démontrerons au chapitre 6.

Dans la suite de ce chapitre, nous présenterons succinctement la méthode dite des tables de probabilité physique, étant donnée son importance dans les modèles déterministes. Une description détaillée de la méthode des moments pour le calcul des tables de probabilité des sections efficaces sera ensuite donnée. La méthodologie proposée par Hébert et Coste dans (Hébert et Coste, 2002) pour le calcul de tables de probabilité corrélées, dérivée du formalisme CALENDF de P. Ribon, sera ensuite donnée. On présentera finalement la méthode de calculs des points de base par l'approche RMS.

4.1 Tables de probabilité physiques

Ce formalisme est probablement le plus répandu : il est notamment à la base des modèles d'autoprotection des codes de réseau déterministes HELIOS (Casal *et al.*, 1991) et WIMS–8 (Halsall, 1995), ainsi que du module `USS:` de DRAGON. Le code TART de Cullen utilise également cette technique. Elle requiert l'utilisation de sections effectives et a été initialement développée par Nikolaev. Cette approche consiste à passer par une équivalence entre notre problème hétérogène et un milieu homogène infini afin de déterminer une section efficace effective équivalente. Cette procédure permet d'obtenir des tables de probabilité dites *physiques* et requiert au préalable la résolution par le module GROUPR de NJOY (MacFarlane et Muir, 2000) de l'équation de ralentissement suivante pour différentes valeurs de σ_e :

$$c\sigma_e + r^*\{\phi(u)\} = [\sigma_t(u) + \sigma_e]\phi(u) \tag{4.1}$$

avec :

- $c = \dfrac{\Sigma_s^+}{\Sigma_t^+}$ le rapport de diffusion,
- $\sigma_e = \dfrac{\Sigma_t^+}{N^*}$ la section efficace de dilution.

La table de probabilité correspondant à la section efficace totale est déterminée de manière à correspondre, à un facteur de tolérance donné, aux valeurs tabulées pour des plages de

valeurs imposées pour la section efficace de dilution σ_e.

$$\overline{\sigma}(\sigma_e) = \frac{\left\langle \dfrac{\sigma}{\sigma + \sigma_e} \right\rangle_g}{\left\langle \dfrac{1}{\sigma + \sigma_e} \right\rangle_g} = \frac{\sum_{k=1}^{K} \dfrac{\omega_k \sigma_k}{\sigma_k + \sigma_e}}{\sum_{k=1}^{K} \dfrac{\omega_k}{\sigma_k + \sigma_e}} \tag{4.2}$$

La détermination de tables de probabilité physiques est donc un problème de *curve fitting* : pour J valeurs de dilutions, l'équation 4.2 comporte $2K$ inconnues. Si $J = 2K$ une méthode itérative peut être utilisée et si $J > 2K$, une approche par moindres carrés est alors nécessaire.

4.2 Tables de probabilité mathématiques

On présente dans cette section la méthode numérique de détermination des tables de probabilité, proposée initialement par P. Ribon (Ribon et Maillard, 1986) et modifiée partiellement dans (Hébert et Coste, 2002). Cette méthode permet l'obtention de tables de probabilité dites *mathématiques* : les poids sont positifs et les points de base σ_k sont compris dans le support $[\min(\sigma(u)); \max(\sigma(u))]$. L'idée de base est qu'une densité de probabilité est égale à la série infinie de ses moments, et donc peut être remplacée par une série tronquée approximant la densité de probabilité exacte. Dans ce formalisme, une table de probabilité d'ordre K est définie comme conservant $2K$ moments de la densité de probabilité associée. On retombe ainsi sur une quadrature de Gauss généralisée. Ces moments sont calculés à partir de données ponctuelles issues du traitement des fichiers PENDF (données *autolibs*). On définit le moment d'ordre ℓ de la section efficace résonnante par l'intégrale de Lebesgue pour la variable σ :

$$\mathcal{M}_\ell = \int_0^\infty d\sigma \Pi(\sigma) \sigma^\ell \ , \tag{4.3}$$

qui peut s'exprimer également sous la forme d'une intégrale de Riemann en léthargie, qui sera utilisée en pratique :

$$\mathcal{M}_\ell = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_{g-1}}^{u_g} du \sigma(u)^\ell \ . \tag{4.4}$$

Hypothèse : *une table de probabilité d'ordre K doit être capable de conserver les $2K$ moments de la densité de probabilité associée :*

$$\sum_{k=1}^{K} \omega_k (\sigma_k)^\ell = \mathcal{M}_\ell \ ; \qquad L_{min} \leq \ell \leq L_{max}. \tag{4.5}$$

On définit ainsi un problème de moment de Stieltjes (Ribon et Maillard, 1986). La conservation du moment d'ordre 0 est imposée par la normalisation des poids, et celle du moment

d'ordre 1 doit permettre de retrouver la section efficace à dilution infinie. Ceci se traduit par les contraintes suivantes sur L_{min} et L_{max} :

$$2 - 2K \leq L_{min} \leq 0 \qquad \text{et} \qquad L_{max} = 2K + L_{min} - 1 \tag{4.6}$$

Les valeurs proposées par Ribon sont alors $L_{min} = 1 - K$ et $L_{max} = K$. Les moments d'ordre négatifs et positifs contribuent respectivement à la conservation des taux de réactions à basse et haute dilution.

4.2.1 Rappels mathématiques

Quelques rappels mathématiques concernant les approximants de Padé et les fonctions génératrices de Stieltjes sont nécessaires afin d'appréhender l'approche par moments. Les démonstrations des théorèmes énoncés ci-après peuvent se retrouver dans l'ouvrage de référence sur les approximants de Padé (Baker, 1975). Les problèmes des moments sont détaillés dans l'ouvrage (Akhiezer, 1965).

Approximant de Padé

Soit f de classe C^∞ sur un intervalle contenant 0. f admet alors un développement en série de Mac-Laurin au voisinage de 0 :

$$f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i \tag{4.7}$$

On dit que $F = \dfrac{P}{Q}$ est un $[p, q]$ approximant de Padé de f si :

$$deg(P) \leq p \ , \tag{4.8}$$
$$deg(Q) \leq q \ ,$$
$$Q(0) = 1 \ ,$$
$$f(z) = \frac{P(z)}{Q(z)} + \mathcal{O}\left(z^{p+q+1}\right) \ . \tag{4.9}$$

En notant $P(z) = \sum_{i=0}^{p} a_i z^i$ et $Q(z) = \sum_{i=0}^{q} b_i z^i$, on a l'égalité formelle :

$$\sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i = \frac{a_0 + a_1 z + \cdots + a_p z^p}{1 + b_1 z + \cdots + b_q z^q} + \mathcal{O}\left(z^{p+q+1}\right) \ . \tag{4.10}$$

Ceci peut se traduire par les deux systèmes linéaires suivants :

$$\begin{pmatrix} c_{p-q+1} & c_{p+q-2} & \cdots & c_p \\ c_{p-q+2} & c_{p+q-3} & \cdots & c_{p+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_p & c_{p+1} & \cdots & c_{p+q-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_q \\ b_{q-1} \\ \vdots \\ b_1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} c_{p+1} \\ c_{p+2} \\ \vdots \\ c_{p+q} \end{pmatrix} \ , \tag{4.11}$$

et :

$$\begin{pmatrix} c_0 & 0 & \cdots & & 0 \\ c_1 & c_0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_2 & c_1 & c_0 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ c_p & \cdots & & \cdots & c_{p-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} \ . \tag{4.12}$$

La résolution du premier système donne les valeurs des $(b_i)_{i \in [1,p]}$, que l'on injecte dans le second système pour obtenir les $(a_i)_{i \in [0,q]}$. Une condition suffisante d'existence et d'unicité de l'approximant de Padé est la non-nullité du déterminant de Hankel :

$$\begin{vmatrix} c_{p-q+1} & c_{p-q+2} & \cdots & c_p \\ c_{p-q+2} & c_{p-q+3} & \cdots & c_{p+1} \\ \vdots & c_{p-q+3} & \cdots & \vdots \\ c_p & c_{p+1} & \vdots & c_{p+q-1} \end{vmatrix} \neq 0 \ . \tag{4.13}$$

D'après (Ribon et Maillard, 1986) cette condition sera respectée dans le cas de moments déterminés à partir d'une densité de probabilité $\Pi(\sigma)$, tant que la précision numérique reste acceptable. On supposera que ce sera toujours le cas en pratique pour les sections efficaces. Dans le cas de la méthode des moments pour la représentation de l'anisotropie, on devra vérifier si ces conditions sont valides.

Série de Stieltjes

On définit une série de Stieltjes pour une fonction f quelconque à partir de la représentation intégrale (dite de Riemann-Stieltjes) suivante :

$$f(z) = \int_0^\infty \frac{d\phi(u)}{1 - zu} \ , \tag{4.14}$$

avec $\phi(u)$ fonction à valeurs réelles bornée, non décroissante sur $[0, +\infty[$. La série formelle de f s'écrit alors $\forall z \in \mathbb{C} \setminus \{\mathbb{R}^+\}$:

$$f(z) = \sum_{j=0}^{+\infty} f_j z^j \ . \tag{4.15}$$

On a le théorème suivant :
Si $f(z)$ est une série de Stieltjes, alors les approximants de Padé $[N + I, N]$ existent pour tout $I \geq -1$ et ont des pôles simples réels négatifs associés à des résidus positifs. $f(z)$ peut ainsi s'écrire :

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{a_0 + a_1 z + \cdots + a_{N+I} z^{N+I}}{b_0 + b_1 z + \cdots + b_N z^N} \\ &= \sum_{i=1}^{N} \frac{\omega_i}{z - z_i} + \mathcal{O}\left(z^{2N+I}\right) \text{ avec } \omega_i > 0 \text{ et } z_i < 0 \ . \end{aligned} \tag{4.16}$$

En particulier, les coefficients z_i seront les racines du polynôme $b_0 + b_1 z + \cdots + b_N z^N$.

4.2.2 Calcul des points de base pour une section efficace totale

On considère dans un premier temps la série de Stieltjes définissant la fonction génératrice des moments pour une section efficace quelconque :

$$F(z) = \int_0^{max(\sigma)} d\sigma \Pi(\sigma) \frac{(z\sigma)^{1-K}}{1 - z\sigma} = \sum_{\ell=1-K}^{K} z^\ell \mathcal{M}_\ell + \mathcal{O}(z^{K+1}) \ . \tag{4.17}$$

On utilise ensuite une approximant de Padé d'ordre $[K - 1, K]$ pour représenter le terme $\sum_{\ell=1-K}^{K} z^\ell \mathcal{M}_\ell$, de telle sorte que

$$z^{K-1} F(z) = \sum_{\ell=0}^{2K-1} z^\ell \mathcal{M}_{\ell-K+1} = \frac{a_0 + a_1 z + \ldots + a_{K-1} z^{K-1}}{b_0 + b_1 z + \ldots + b_{K-1} z^{K-1} + z^K} \ , \tag{4.18}$$

D'où

$$\left(z^K + \sum_{k=0}^{K-1} b_k z^k\right)\left(\sum_{\ell=0}^{2K-1} z^\ell \mathcal{M}_{\ell-K+1}\right) = \sum_{k=0}^{K-1} a_k z^k \ . \tag{4.19}$$

Par identification des coefficients des monômes en z d'ordre compris entre K et $2K-1$, on obtient le système ayant comme inconnues les termes b_k :

$$\begin{pmatrix} \mathcal{M}_k & \mathcal{M}_{k-1} & \dots & \mathcal{M}_1 \\ \mathcal{M}_{k-1} & \mathcal{M}_{k-2} & \dots & \mathcal{M}_0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{M}_1 & \mathcal{M}_0 & \dots & \mathcal{M}_{2-K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{K-1} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathcal{M}_0 \\ \mathcal{M}_{-1} \\ \vdots \\ \mathcal{M}_{1-K} \end{pmatrix} \ . \tag{4.20}$$

Une factorisation de type LDL^T pour la matrice des coefficients est ensuite réalisée, avec comme inconnues les coefficients b_n. En utilisant la propriété relative aux approximants de Padé d'une série de Stieltjes, les points de base σ_k sont les racines du polynôme suivant :

$$\prod_{k=1}^{K}(z-\sigma_k) = b_0 + b_1 z + \ldots + b_{K-1} z^{K-1} + z^K \ . \tag{4.21}$$

4.2.3 Calcul des poids

Dans l'approche initiale de P. Ribon, les poids ω_k sont déterminés par une approche RMS du système dégénéré suivant :

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{-\frac{\omega_k}{\sigma_k}}{1-\frac{z}{\sigma_k}} = \frac{a_0 + a_1 z + \cdots + a_{K-1} z^{K-1}}{(z-\sigma_1)(z-\sigma_2)\cdots(z-\sigma_K)} \ . \tag{4.22}$$

La détermination des poids proposée dans (Hébert et Coste, 2002) sous le nom de méthode de Ribon étendue vise à stabiliser numériquement cette étape. Ici, les poids de la table de probabilité sont calculés directement à partir des points de base, de telle façon à conserver certains moments de la section efficace totale :

$$\mathcal{M}_\ell = \sum_{k=1}^{K} \omega_k \sigma_k^\ell \ . \tag{4.23}$$

Par ailleurs, les poids sont calculés par conservation des moments d'ordre compris entre $[-K/2;(K-1)/2]$, i.e. les solutions du système linéaire :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \sigma_1 & \sigma_2 & \dots & \sigma_K \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_1^{K-1} & \sigma_2^{K-1} & \dots & \sigma_K^{K-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1(\sigma_1)^{k_0} \\ \omega_2(\sigma_2)^{k_0} \\ \vdots \\ \omega_K(\sigma_K)^{k_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{k_0} \\ \mathcal{M}_{k_0+1} \\ \vdots \\ \mathcal{M}_{k_1} \end{pmatrix} . \tag{4.24}$$

Avec : $k_0 = -K/2$ et $k_1 = (K-1)/2$. On obtient ainsi une matrice de Vandermonde, dont la solution analytique existe pour ω_k, $1 \le k \le K$:

$$\omega_k = \frac{(-1)^{K-1}(\sigma_k)^{-k_0}}{\prod\limits_{\substack{\ell=1 \\ \ell\neq k}}^{K}(\sigma_\ell - \sigma_k)} \sum_{\ell=0}^{K-1} c_{k,\ell}\mathcal{M}_{k_0+\ell} . \tag{4.25}$$

Les coefficients $c_{k,\ell}$ sont les coefficients du polynôme suivant :

$$c_{k,0} + c_{k,1}z + \ldots + c_{k,K-1}z^{K-1} = \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell\neq k}}^{K}(z - \sigma_\ell) . \tag{4.26}$$

4.2.4 Points de base pour une section efficace partielle

D'après (Ribon et Maillard, 1986), le calcul des points de base pour une section efficace partielle doit conserver K moments, compris entre $\frac{-K}{2}$ et $\frac{K-1}{2}$. Les relations sont donc similaires aux calculs des poids. Les moments pour les réactions partielles sont définis par :

$$\mathcal{M}_\ell = \frac{1}{\Delta u}\int_{u_g}^{u_{g-1}} du\sigma_\rho(u)\sigma^\ell(u) , \tag{4.27}$$

D'où, pour $\frac{-K}{2} \le \ell \le \frac{1-K}{2}$:

$$\mathcal{M}_\ell = \sum_{k=1}^{K} \omega_k\sigma_{\rho,k}\sigma_k^\ell . \tag{4.28}$$

On obtient le système linéaire suivant :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \sigma_1 & \sigma_2 & \dots & \sigma_K \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_1^{K-1} & \sigma_2^{K-1} & \dots & \sigma_K^{K-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1(\sigma_1)^{k_0}\sigma_{\rho,1} \\ \omega_2(\sigma_2)^{k_0}\sigma_{\rho,2} \\ \vdots \\ \omega_K(\sigma_K)^{k_0}\sigma_{\rho,K} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{k_0} \\ \mathcal{M}_{k_0+1} \\ \vdots \\ \mathcal{M}_{k_1} \end{pmatrix} , \tag{4.29}$$

Avec : $k_0 = -K/2$ et $k_1 = (K-1)/2$. La matrice de Vandermonde peut s'inverser analytiquement pour obtenir les coefficients $\omega_{\rho,k}$, $1 \leq k \leq K$:

$$\sigma_{\rho,k} = \frac{(-1)^{K-1}(\sigma_k)^{-k_0}}{\omega_k \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq k}}^{K} (\sigma_\ell - \sigma_k)} \sum_{\ell=0}^{K-1} c_{k,\ell} \mathcal{M}_{k_0+\ell} \ . \tag{4.30}$$

Les coefficients $c_{k,\ell}$ sont les coefficients du polynôme suivant :

$$c_{k,0} + c_{k,1} z + \ldots + c_{k,K-1} z^{K-1} = \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq k}}^{K} (z - \sigma_\ell) \ . \tag{4.31}$$

Nous avons retenu cette méthode dans cette étude, en particulier pour déterminer les points de base pour les sections efficaces de diffusion, de fission, et ceux de la matrice de diffusion.

4.2.5 Matrice de poids corrélés entre deux isotopes

On rappelle dans cette section l'approche développée dans (Hébert et Coste, 2002) pour le calcul de poids corrélés entre 2 isotopes a et b. Une telle table de probabilité est dite à 2 dimensions, ou 2D, et s'écrit simplement sous la forme $\omega^{ab}_{k,\ell}$, avec $k \in [1, K]$ et $\ell \in [1, L]$ les ordres respectifs des tables de probabilité dans un groupe g pour les isotopes a et b. En théorie, il est possible de définir des matrices de poids corrélés à des dimensions supérieures pouvant prendre en compte plusieurs effets de recouvrements, mais le gain en précision serait mitigé par la perte de stabilité de l'algorithme. Les données autolibs peuvent être ici combinées, de façon à définir les comoments suivants :

$$\mathcal{M}_{m,n} = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{u_g}^{u_{g-1}} du \sigma^a(u)^m \sigma^b(u)^n \ , \tag{4.32}$$

avec $\sigma^a(u)$ et $\sigma^b(u)$ les sections efficaces microscopiques totales pour les isotopes a et b. La table de probabilité doit conserver les moments établis à l'équation 4.32, de telle sorte que

$$\sum_{k=1}^{K} \sum_{\ell=1}^{L} \omega^{ab}_{k,\ell} (\sigma^a_k)^m (\sigma^b_\ell)^n = \mathcal{M}_{m,n} \ . \tag{4.33}$$

L'approche numérique pour déterminer les poids corrélés est alors la suivante :

- La table de probabilité 1D pour la section efficace totale $\{\omega^a_k, \sigma^a_k\}_{k \in [1,K]}$ est calculée de telle sorte à préserver les moments $\mathcal{M}_{m,0}$ de l'isotope a pour $m \in [1-K, K]$.
- La table de probabilité 1D pour la section efficace totale $\{\omega^b_\ell, \sigma^b_\ell\}_{\ell \in [1,L]}$ est calculée de

telle sorte à préserver les moments $\mathcal{M}_{0,n}$ de l'isotope b pour $n \in [1-L, L]$.

- Les poids corrélés sont calculés de manière à préserver les moments $\mathcal{M}_{m,n}$ avec $\frac{1-K}{2} \leq m \leq \frac{K}{2}$ et $\frac{1-L}{2} \leq n \leq \frac{L}{2}$.

L'étape (3) conduit à la résolution d'un système matriciel dont la solution analytique existe. Si l'on pose

$$\mathbf{V_1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \sigma_1^a & \sigma_2^a & \cdots & \sigma_K^a \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\sigma_1^a)^{K-1} & (\sigma_2^a)^{K-1} & \cdots & (\sigma_K^a)^{K-1} \end{pmatrix} , \tag{4.34}$$

et

$$\mathbf{V_2} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \sigma_1^b & \sigma_2^b & \cdots & \sigma_L^b \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\sigma_1^b)^{L-1} & (\sigma_2^b)^{L-1} & \cdots & (\sigma_L^b)^{L-1} \end{pmatrix} \tag{4.35}$$

ainsi que les deux matrices diagonales

$$\mathbf{D_1} = \begin{pmatrix} (\sigma_1^a)^{k_0} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (\sigma_2^a)^{k_0} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (\sigma_K^a)^{k_0} \end{pmatrix} , \tag{4.36}$$

$$\mathbf{D_2} = \begin{pmatrix} (\sigma_1^b)^{\ell_0} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (\sigma_2^b)^{\ell_0} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (\sigma_L^b)^{\ell_0} \end{pmatrix} , \tag{4.37}$$

avec $k_0 = \frac{1-K}{2}$ et $\ell_0 = \frac{1-L}{2}$. On note également $\mathcal{M}$, matrice des comoments :

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{1,1} & \cdots & \mathcal{M}_{1,L} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{M}_{K,1} & \cdots & \mathcal{M}_{K,L} \end{pmatrix} . \tag{4.38}$$

La matrice des poids corrélés s'écrit simplement

$$\omega^{ab} = \mathbf{D_1}^{-1}\mathbf{V_1}^{-1} [\mathcal{M}] \left[\mathbf{V_2}^{-1}\right]^{\mathrm{T}} \mathbf{D_2}^{-1} . \tag{4.39}$$

Comme précédemment, les inverses des matrices de Vandermonde $\mathbf{V_1}$ et $\mathbf{V_2}$ sont calculés à partir de leur solutions analytiques.

4.3 Méthode des sous-groupes projetés

La méthode présentée ici est directement issue de la référence (Hébert, 2008) et est reliée à la définition des maillages SHEM étendus. Si dans ce formalisme, les tables de probabilité CALENDF sont utilisées pour la section efficace totale, le calcul est différent pour les réactions partielles où une approche RMS est appliquée. Ces tables de probabilité seront utilisées succinctement au cours du chapitre 6, dans le cadre du code Monte Carlo proposé et pour le calcul d'auto-protection du code DRAGON.

4.3.1 Maillages SHEM étendus

Le développement récent de maillages énergétiques avancés tels que SHEM–295 et SHEM–361 permet l'utilisation de tables de probabilité mathématiques de type CALENDF, calculées tels que décrit précédemment, sans prendre en compte les effets dits de ralentissements corrélés. La simplification du modèle de Ribon étendu est rendu possible grâce à une augmentation du nombre de groupes dans la partie thermique haute et épithermique (domaine des résonances résolues), soit précisement là où les effets de corrélation sont importants. Les caractéristiques des maillages SHEM sont les suivantes :

- Maillage SHEM–281 (Hfaiedh et Santamarina, 2005) : une des améliorations est que le domaine des résonances résolues est remonté jusqu'à 22.5 eV par rapport au maillage XMAS.
- Maillage SHEM–361 (Hébert et Santamarina, 2008) : le nombre de groupes est augmenté entre 22.5 eV et 11.14 keV par rapport au maillage SHEM-281.
- Maillage SHEM–295 (Hébert, 2008) : la structure du maillage SHEM-361 est conservée pour la partie du spectre supérieure à 22.5 eV. La partie inférieure est remodelée, il est de nouveau nécessaire d'appliquer un modèle d'auto-protection au dessus de 4.63 eV.

Le terme de *méthode des sous-groupes projetés* ou SPM (subgroup projection method) a été retenu pour décrire la méthodologie d'auto-protection se basant sur le modèle de Ribon étendu sans prise en compte des effets de ralentissement corrélés. La stratégie d'auto-protection retenue dans la méthode SPM est alors :

- SHEM–295 : utilisation de tables de probabilité de type CALENDF entre 4.63 eV et 1.14 Kev. Au delà, les tables de probabilité physiques sont utilisées.
- SHEM–361 : utilisation de tables de probabilité de type CALENDF entre 22.5 eV et 1.14 Kev. On applique également le modèle ST avec tables de probabilité physiques

au-dessus de 1.14 keV.

4.3.2 Implémentation numérique

La première étape consiste à appliquer la méthode CALENDF afin de déterminer la table de probabilité $\{\omega_k, \sigma_k\}_{k\in[1,K]}$.

Le solveur de GROUPR est utilisé afin de résoudre analytiquement l'équation de ralentissement 4.1, ceci pour un certain nombre de valeurs de dilutions σ_e (généralement 10 ou 18, espacées logarithmiquement).

La méthode de détermination des tables de probabilité nécessaires au modèle SPM repose sur la conservation des moments définis tels que :

$$\mathcal{F}_\ell(\sigma_e) = \frac{1}{\Delta u_g}\int_{u_{g-1}}^{u_g} du \frac{\langle\sigma_s\phi\rangle_g + \sigma_e}{\sigma(u)+\sigma_e}\sigma(u)^\ell \ , \tag{4.40}$$

Par conservation de K moments, les termes $\mathcal{F}_\ell(\sigma_e)$ doivent vérifier l'équation suivante :

$$\sum_{k=1}^{K} \omega_k \phi_k(\sigma_e)\sigma_k^\ell = \mathcal{F}_\ell(\sigma_e); \qquad (1-K)/2 \le \ell \le K/2 \ . \tag{4.41}$$

On obtient alors le système linéaire :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \sigma_1 & \sigma_2 & \dots & \sigma_K \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_1^{K-1} & \sigma_2^{K-1} & \dots & \sigma_K^{K-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1(\sigma_1)^{k_0}\phi_1(\sigma_e) \\ \omega_2(\sigma_2)^{k_0}\phi_2(\sigma_e) \\ \vdots \\ \omega_K(\sigma_K)^{k_0}\phi_K(\sigma_e) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{k_0}(\sigma_e) \\ \mathcal{F}_{k_0+1}(\sigma_e) \\ \vdots \\ \mathcal{F}_{k_1}(\sigma_e) \end{pmatrix} . \tag{4.42}$$

avec : $k_0 = -K/2$ et $k_1 = (K-1)/2$. On obtient ainsi une matrice de Vandermonde, dont la solution analytique est :

$$\phi_k(\sigma_\mathrm{e}) = \frac{1}{\omega_k}\frac{(-1)^{K-1}\ (\sigma_k)^{-k_0}}{\prod\limits_{\substack{\ell=1\\ \ell\neq k}}^{K}(\sigma_\ell-\sigma_k)}\sum_{\ell=0}^{K-1} c_{k,\ell}\ \mathcal{F}_{k_0+\ell}(\sigma_\mathrm{e}) \tag{4.43}$$

avec $1 \leq k \leq K$ et les $c_{k,\ell}$ sont les coefficients du polynôme suivant :

$$c_{k,0} + c_{k,1}z + \ldots + c_{k,K-1}z^{K-1} = \prod_{\ell=1,\ell\neq k}^{K} (z - \sigma_\ell) \ . \tag{4.44}$$

On suppose de plus que le nombre de dilutions L est supérieur à K. On obtient la matrice rectangulaire suivante :

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} \phi_1(\sigma_{e,1}) & \phi_2(\sigma_{e,1}) & \ldots & \phi_K(\sigma_{e,1}) \\ \phi_1(\sigma_{e,2}) & \phi_2(\sigma_{e,2}) & \ldots & \phi_K(\sigma_{e,2}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(\sigma_{e,L}) & \phi_2(\sigma_{e,L}) & \ldots & \phi_K(\sigma_{e,L}) \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \ . \tag{4.45}$$

Cette matrice est ensuite factorisée suivant l'algorithme QR :

$$\mathcal{F} = \mathcal{QR} = \mathcal{Q} \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 \\ \mathcal{R}_2 \end{bmatrix} \tag{4.46}$$

avec $\mathcal{Q}$ une matrice orthogonale de rang $(L+1) \times (L+1)$, $\mathcal{R}_1$ $K \times K$ matrice triangulaire supérieure et $\mathcal{R}_2$ $(L+1-K) \times K$ matrice non calculée et non utilisée. La solution *Root Mean Square* (RMS) d'un système linéaire quelconque

$$\mathcal{F}\vec{x} = \vec{\tau} \tag{4.47}$$

peut alors s'écrire

$$\mathcal{R}\vec{x} = \mathcal{Q}^\top \vec{\tau} = \vec{y} \tag{4.48}$$

On utilise alors cette propriété : pour une réaction quelconque ρ dans le groupe g, les quantités $\vec{x} = \{\omega_k; \sigma_{\rho,k}\}_{k\in[1,K]}$ nécessitent la résolution du système :

$$\mathcal{F}\vec{x} = \vec{\tau} \ . \tag{4.49}$$

Avec $\vec{\tau} = \{\tau_\rho(\sigma_{e,1}), \tau_\rho(\sigma_{e,2}), \ldots, \tau_\rho(\sigma_{e,L}), \tau_\rho(\sigma_{e,\infty}) \ ,\}$ les taux de réactions de référence pour la réaction ρ dans le groupe g, précalculés dans NJOY :

$$\tau_\rho(\sigma_e) = \sigma_{\rho,g}(\sigma_e)\phi_g(\sigma_e) \ . \tag{4.50}$$

En répétant cette procédure RMS pour toutes les réactions partielles (diffusion, matrice de transfert, fission, absorption, etc.), on obtient les différents points de base

$\vec{x}_\rho = \{\omega_1\sigma_{\rho,1},\, \omega_2\sigma_{\rho,2}, \ldots,\, \omega_K\sigma_{\rho,K}\}$ via

$$\vec{x}_\rho = \left(\mathcal{F}^\top\mathcal{F}\right)^{-1}\mathcal{F}^\top\vec{\tau}_\rho \quad . \tag{4.51}$$

CHAPITRE 5

ALGORITHME MONTE CARLO AVEC TABLES DE PROBABILITÉ

5.1 Cadre d'implantation numérique

La méthode de Monte Carlo avec tables de probabilité a été réalisée dans une version de développement du code de réseau DRAGON, en tant que module indépendant nommé `MC:`. Au départ de ce projet, un algorithme Monte Carlo basé sur la méthode de Woodcock était disponible dans la Version 4 du code DRAGON (Arsenault et Le Tellier, 2008; Arsenault *et al.*, 2008) dans une première version Fortran 77 de `MC:`. Plusieurs modifications du jeu analogue avaient été introduites alors, notamment la méthode de fission implicite, la méthode de fractionnement (splitting) et la stratégie de roulette russe associée. Ces techniques ont été conservées dans la seconde version du code réalisée dans ce projet, et on les décrira par la suite.

Initialement le solveur Monte Carlo avait comme caractéristique d'être branché sur le module de tracking `NXT:` afin de construire un modèle géométrique compatible avec un algorithme Monte Carlo, et d'utiliser uniquement des sections efficaces macroscopiques (format L_MACROLIB). Etant donné que la récupération d'objets géométriques internes, initialement définis pour les méthodes de résolution déterministes telles que la méthode des probabilités de collision ou la méthode des caractéristiques engendraient une complexité et une rigidité non nécessaires, le choix d'une reprogrammation complète du module a rapidement été envisagée. Dans ce cadre, le nouveau module a été programmé en Fortran 95/2003 autour de la nouvelle version de la GANLIB (Hébert et Roy, 2009), réécrite en language C ISO et qui permet l'écriture de codes dans un langage moderne tout en respectant les standards ISO (code 64 bit-clean notamment). Un guide d'utilisation complet et dans le format officiel des outils pour la neutronique développés à l'Institut de Génie Nucléaire est donné en annexe.

Le traitement de la géométrie et les routines de tracking, constituant l'essentiel d'un code Monte Carlo ont été entièrement reconçus. La définition de la géométrie fait partie désormais des paramètres d'entrée du module `MC:`. L'approche retenue est de définir chaque type de géométrie suivant une classe différente, et de rajouter les fonctions (méthodes) d'interrogations nécessaires à la méthode de Woodcock. On peut ainsi étendre aisément le nombre de géométries analysables.

Le code réalise initialement la recopie de l'information disponible dans l'objet L_MICROLIB produit par le module `LIB:` et contenant les sections efficaces microscopiques multigroupes et les tables de probabilité des isotopes résonnants. Enfin, l'algorithme Monte Carlo combinant méthode de Woodcock et tables de probabilité a été programmé. La voie de calcul avec sections efficaces macroscopiques a été conservée.

Le code `MC:` permet également de produire des sections efficaces macroscopiques, qui peuvent être éventuellement transcrites dans le format L_MACROLIB et être ainsi utilisées par d'autres codes (DONJON, MORET). Il peut également générer un fichier compatible avec matlab (ou équivalent open source) comprenant les informations pertinentes (taux de réactions, flux) afin de faciliter le post-traitement.

Dans ce chapitre, les sections 5.2 et 5.3 présentent l'algorithme Monte Carlo du code `MC:`. On expose ensuite à la section 5.4 une description de l'implantation informatique du code et en particulier des méthodes utilisées pour la poursuite neutronique.

5.2 Modifications du jeu analogue

L'algorithme de Monte Carlo programmé dans `MC:` n'est pas analogue, c'est-à-dire que les poids des neutrons sont modifiés afin d'optimiser le temps de calcul en réduisant la variance.

La première modification est connue sous le nom de *modèle de fission implicite*, où l'on tient compte de la fission par modification du poids du neutron. Dans notre approche, si une réaction de fission est obtenue, le poids est modifié suivant

$$\omega' = \omega \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_a} \ , \tag{5.1}$$

Le terme $\frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_a}$ correspond simplement au nombre moyen de neutrons émis par absorption.

La modification des poids des neutrons rend nécessaire l'introduction de deux techniques classiques connues sous le nom de *splitting* (fractionnement) et de *roulette russe*. Tenir compte de la fission par augmentation des poids peut en effet conduire à des neutrons de très forts ou de très faibles poids, ce qui peut conduire un important bruit statistique et nuire à la convergence. La technique de fractionnement implantée dans `MC:` consiste à diviser les neutrons sources de poids importants en Λ neutrons source. On considère un calcul classique de

N cycles de M neutrons. Au cycle n pour le neutron m, on définit $\Lambda_{m,n}$ par

$$\Lambda_{m,n} = \max\left(1, \left\lfloor \frac{\omega'_{m,n-1}}{k_{\mathrm{eff,n-1}}} \right\rfloor\right) \tag{5.2}$$

avec $\lfloor . \rfloor$ le symbole de la partie entière, et $\omega'_{m,n-1}$ le poids du neutrons source ayant déclenché la fission au cycle $n-1$, $k_{\mathrm{eff,n-1}}$ le facteur de multiplication effectif au cycle $n-1$. Le poids du neutron est modifié alors suivant

$$\omega_{m,n} = \frac{\omega'_{m,n-1}}{\Lambda_{m,n} k_{\mathrm{eff,n-1}}} \ . \tag{5.3}$$

L'introduction du k_{eff} au dénominateur de l'expression 5.3 force la dimension totale de la source à rester constante pour chaque cycle :

$$\sum_m \omega_{m,n} \Lambda_{m,n} = M \ . \tag{5.4}$$

Un estimateur du k_{eff} apparait alors, noté « source » dans `MC:`

$$k_{\mathrm{eff,n}} = \frac{1}{M} \sum_m \omega'_{m,n} \ . \tag{5.5}$$

On initialise les poids des neutrons à 1 ainsi que le k_{eff}. Comme mentionné dans (Lux et Koblinger, 1990), toute technique de splitting doit s'accompagner d'une roulette russe. Cette approche permet d'éliminer *sans introduire de biais* les neutrons de poids très faibles apparaissant nécessairement dans les cas de groupes présentant des faibles sections efficaces de fission. L'idée est de « tuer » aléatoirement les neutrons qui sont en dessous d'une certaine limite de poids imposée par l'utilisateur. L'approche retenue dans `MC:` consiste à appliquer la roulette russe à la fin de chaque génération pour lesquelles le nombre de neutrons sources M' est supérieur à M. Dans ce cas, les neutrons sont stockés dans un tampon et classés par ordre de poids, et la valeur limite est fixée à $\omega_{limit} = \omega_{M,n-1}$. On teste tous les neutrons sources et si $\omega_{m,n} > \omega_{limit}$ le neutron source est conservé pour le cycle suivant. Sinon, on applique le test aléatoire suivant

$$\omega''_{m,n-1} = \begin{cases} \omega_{limit} \ \text{ si } \ r \leq \dfrac{\omega'_{m,n-1}}{\omega_{limit}} \ , \\ 0 \ , \ \text{sinon} \ . \end{cases} \tag{5.6}$$

Le nombre maximal de neutrons pouvant être stocké est imposé ici à $M' = 2M$, ce qui est suffisant en pratique pour les applications visées. Dans le cas de `MC:`, les deux estimateurs « source » et « collision » du coefficient de multiplication effectif sont disponibles. Le flux

intégré au cycle n est défini suivant :

$$\phi_n(\mathbf{r}, g) = \frac{1}{M} \sum_i \frac{\omega_i}{\Sigma^*} \ , \tag{5.7}$$

avec i le nombre total de collisions (réelles et virtuelles) dans l'élément $\{r, g\}$ au cours du cycle n. Similairement, les taux de réactions sont calculés par

$$R_{\rho,n} = \frac{1}{M} \sum_i \frac{\omega_i \Sigma_\rho}{\Sigma^*} \ . \tag{5.8}$$

Les sections efficaces condensées et homogénéisés générées par `MC:` s'obtiennent via division des taux de réactions par le flux.

$$\Sigma(\mathbf{r}, g)_{\rho,n} = \frac{R_{\rho,n}}{\phi_n(\mathbf{r}, g)} \ . \tag{5.9}$$

Les valeurs moyennées $\overline{X}_N$ pour N cycles viennent finalement associées à une erreur statistique, calculées suivant

$$\bar{\epsilon}(\overline{X}_N) = \frac{\sigma(X_N)}{\overline{X}_N} \ . \tag{5.10}$$

Les relations précédentes sont valides dans les options de calcul de `MC:`, c'est-à-dire lorsque les sections efficaces sont par isotope avec tables de probabilité, ou macroscopique par matériel. Dans le cas isotopique, on reconstruit simplement à chaque collision la section efficace macroscopique du matériel.

5.3 Algorithme de marche aléatoire avec tables de probabilité et Delta-tracking

L'utilisation de sections efficaces sous forme de tables de probabilité dans un algorithme Monte Carlo pour le calcul de criticité n'introduit pas de grosses modifications vis-à-vis du cas multigroupe décrit au chapitre sur les méthodes Monte Carlo de l'ouvrage (Hébert, 2009). On donne ici un aperçu de l'algorithme implanté pour la poursuite neutronique :

1. Détermination des propriétés du neutron source :
   - Coordonnées spatiales.
   - Index de l'isotope fissile i produisant le neutron source.
   - Echantillonnage du groupe d'énergie g à partir de $\chi_i(E)$
   - Echantillonnage de la direction initiale, considérée isotrope dans le référentiel LAB.
2. Calcul des sections efficaces macroscopiques à partir des sections efficaces isotopiques multigroupes. Si l'isotope est résonnant dans le groupe considéré alors :

- Dans le cas de tables de probabilité 1D, on échantillonne pour chaque isotope i la valeur de la section efficace $\sigma_t^i = \sigma_{t,k}^i$, suivant la probabilité ω_k. Les réactions partielles viennent associer σ_ρ^i à $\sigma_{\rho,k}^i$.
- Dans le cas où l'on dispose des matrices de poids corrélés entre deux isotopes a et b, on échantillonne d'abord $\sigma_t^b = \sigma_{t,\ell}^b$ avec une probabilité ω_ℓ^b, puis on échantillonne la valeur de la section efficace microscopique σ_t^a suivant la probabilité $\frac{\omega_{k,\ell}^{ab}}{\omega_\ell^b}$. Plusieurs techniques ont été testées afin de déterminer l'isotope b au cours de la marche aléatoire. L'option retenue est d'imposer b comme l'isotope fissile ayant produit le neutron source. Aucun biais n'est introduit dans les résultats, comme cela sera justifié au chapitre 6. Les isotopes a et b doivent être spatialement corrélés, c'est-à-dire présents dans le même matériel et peuvent être permutés, étant donné que $\left(\omega_{K,L}^{ab}\right) = {}^t\left(\omega_{L,K}^{ba}\right)$.

3. Calcul de la section efficace totale de chaque mélange au groupe g considéré : $\Sigma_{t,r} = \sum_{i \in [r,g]} N_i \sigma_t^i$, où N_i est la densité pour l'isotope i.
4. Calcul de la section efficace majorante suivant $\Sigma_{m,g} = \max_{r \in V}(\Sigma_{t,r,g})$.
5. Échantillonnage du libre parcours moyen avant collision.
6. Déplacement du neutron dans le milieu $\mathbf{r}$ s'il n'y a pas eu fuite à l'extérieur de la géométrie.
7. Tirage aléatoire pour déterminer si la collision est réelle ou virtuelle suivant la probabilité $P_{reel}^g = \frac{\Sigma_r^g}{\Sigma_{m,g}}$:
   - Dans le cas où la collision est virtuelle, on rééchantillonne le libre parcours en conservant la même direction.
   - Dans le cas d'une collision réelle :
     - On échantillonne l'isotope collisionné i dans la région $\{r, g\}$ suivant la probabilité $\frac{N_i \sigma_t^i}{\Sigma_{t,r,g}}$,
     - On échantillonne la réaction suivant $\frac{\sigma_\rho^i}{\sigma_t^i}$.
     - Dans le cas d'une diffusion, le groupe secondaire g' est tiré aléatoirement suivant $\frac{\sigma_{s,k,0}^{i,g' \leftarrow g,0}}{\sigma_{s,k,0}^i}$ où $\sigma_{s,k,0}^{i,g' \leftarrow g}$ et $\sigma_{s,k,0}^i$ sont les matrices de transfert et la section efficace totale de diffusion à l'ordre P_0. On détermine ensuite le cosinus de diffusion μ suivant la loi d'anisotropie souhaitée, typiquement via transformation des moments de Legendre de la matrice de transfert (voir chapitre 7).
     - Dans le cas d'une fission, l'index de l'isotope est conservé et le poids du neutron modifié suivant l'équation 5.1.
     - Dans le cas d'une absorption, l'histoire est terminée.

La détermination de la section efficace majorante pour la méthode de Delta-tracking impose l'échantillonnage préliminaire des valeurs des sections efficaces dans les tables de probabilité. Il faut noter que cela n'intervient que dans les groupes résonnants et pour les isotopes résonnants. En pratique, cela n'engendre qu'un très faible coût de calcul, comme cela sera démontré au chapitre 6. La partie « échantillonnage » ne représente en général qu'une faible fraction ($\leq 10\%$) du temps total de calcul de la marche aléatoire. La majeur partie reste la localisation du neutron, l'analyse de la collision et éventuellement les phases d'encaissement.

Il serait néanmoins intéressant de tester l'approche par tables de probabilité dans le cas d'un algorithme de Monte Carlo reposant sur l'approche conventionnelle de ray-tracing, où l'échantillonnage dans les tables de probabilité ne serait nécessaire que dans le milieu où l'on a la collision.

5.4 Programmation du code `MC`:

5.4.1 Modèles géométriques

Le traitement et l'analyse de la géométrie constituent la majeure partie d'un code Monte Carlo pour le transport de particules, et différentes méthodes coexistent. Bien que programmée de manière totalement indépendante, l'approche retenue dans ce projet est très similaire à celle du code SERPENT. Ceci s'explique par le fait que les deux codes sont spécifiquement conçus pour le calcul de réseau. L'approche naturelle consiste dans ces cas précis à décomposer la géométrie en différents niveaux de réseau imbriqués. L'exemple typique est le cas d'un assemblage REP : chaque cellule est définie indépendamment, et est finalement imbriqué au niveau d'un réseau (niveau assemblage). On peut ensuite réaliser un réseau d'assemblage afin de constituer le dernier niveau de la géométrie (cœur complet). On peut procéder similairement dans le cas d'un réseau hexagonal. D'autres approches existent, typiquement l'approche surfacique (présente dans MCNP, TART, KENO, etc.) où les volumes sont définis via combinaison de surfaces et peuvent être assemblés via des opérateurs booléen.

5.4.2 Choix d'un langage orienté objet

Comme mentionné dans l'introduction, le solveur Monte Carlo est architecturé autour d'une nouvelle version de la GANLIB, réécrite en C. Cela a permit l'utilisation du standard moderne du Fortran (95/2003/2008) et d'éviter les nombreuses limitations obsolètes du standard 77. En effet, les standards 95 et suivants (2003,2008) favorisent une programmation structurée, typiquement via l'utilisation de classes et de modules internes. Dans ce projet,

on a tenté d'utiliser au maximum les structures sous forme de types dérivées (dénomination Fortran d'une classe), puis d'y associer des fonctions génériques (méthodes), et d'encapsuler le tout dans différents modules indépendants (géométrie, sections efficaces, poursuite neutronique, etc...), par analogie avec un langage classique comme le C++. Ceci permet d'améliorer la qualité de la programmation (moins d'erreurs, lisibilité accrue) tout en favorisant une prise en main future par d'autres développeurs. Une partie du code peut être ainsi modifiée localement sans difficulté. Une autre amélioration vis-à-vis des versions précédentes de DRAGON concerne l'allocation dynamique de la mémoire. Dans les versions antérieures, celle-ci reposait sur l'utilisation des fonctions C (malloc.c, free.c), très efficaces mais qui contribuent à l'opacité du code. Les standards modernes éliminent cette difficulté (attribut *allocate*). On a utilisé en particulier la possibilité d'allouer dynamiquement les composantes d'un type dérivé (norme 2003). Ceci permet une optimisation importante des ressources mémoires et permet d'utiliser l'objet dans différents cas (polymorphisme). On présentera dans la suite quelques exemples de types dérivées et de méthodes associées.

5.4.3 Sections efficaces et tables de probabilité

Le formalisme des tables de probabilité s'additionne facilement avec les données multigroupe classique. En effet, ces données seront présentes dans les groupes résonnants, pour les isotopes résonnants. L'utilisation de classes facilitent la programmation. Ainsi, la librairie interne est définie suivant un objet pouvant contenir plusieurs types dérivés :

```
type cross_section
    type(probability_table) ,dimension(:), allocatable :: pt   !pt(ngrp)
    type(multigroup_cross_section),dimension(:),allocatable :: xs !xs(ngrp)
    integer,dimension(3) :: name
    double precision :: density
    logical :: fissile
    type(scat_pt_dim) ,dimension(:),allocatable:: scat_dim
end type cross_section
```

La classe *probability_table* n'étant qu'une simple extension de la classe *multigroup_cross_section*. Elle peut être définie via l'attibut *extends* du standard 2003 :

```
 type, extends(multigroup_cross_section) :: probability_table
     double precision,dimension(:),allocatable :: weight
end type probability_table
```

La librairie interne peut être aisémment récupérée de l'objet L_MICROLIB (sections efficaces microscopiques avec tables de probabilité) ou L_MACROLIB (sections efficaces macroscopiques).

```
type(cross_section),dimension(:),allocatable :: internal_library
```

Dans le cas de l'utilisation de tables de probabilité, les types dérivés nécessaires seront alloués via

```
!Allocation of the internal library (derived-type)
allocate(internal_library(nbiso),stat=iok)
do iso=1,nbiso
   allocate(internal_library(iso)%pt(ngrp),stat=iok)!probability tables
enddo
```

5.4.4 Programmation des structures géométriques

Etant donné que l'algorithme de marche aléatoire repose sur la méthode de Delta-tracking, la fonction d'interrogation de la géométrie est réduite à résoudre l'équation

$$\mathcal{F}(x, y, z) = \text{Indice_materiel} .$$

En résumé, on a uniquement besoin de connaître l'indice du milieu en fonction des coordonnées du neutron, elles-mêmes calculées par la relation $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + s\mathbf{\Omega}$. L'indice du milieu permet d'accéder à la composition isotopique, et donc de sélectionner l'isotope collisionné et le type de réaction. Etant donné que le calcul de réacteur se réalise usuellement sur des cellules régulières assemblées (ou non) en réseau, l'approche retenue a été de définir des types dérivés (ou objet) pour chaque élément (cellule 1D plan, 2D/3D Cartésien, Sphère 1D, Cylindre 1D par exemple). Les éléments réguliers peuvent être combinés en réseau réguliers, afin de définir les géométries rencontrées en physique des réacteurs tels que des assemblages REP et CANDU (voir notamment l'Annexe I pour une liste exhaustive). La figure 5.4.4 présente une modélisation UML simplifiée des classes géométriques utilisées, où l'on imbrique simplement les types géométriques en différents niveaux. Pour l'instant, uniquement les assemblages réguliers cartésiens que l'on retrouve dans les réacteurs thermiques REP, REB et CANDU sont modélisables, un travail similaire pourrait être réalisé pour étendre notre module aux cas hexagonaux. Ainsi, un assemblage REP consistué de 17×17 crayons est un type *réseau cartésien*, constitué de 289 cellules unitaires cartésiennes 2D, elles-mêmes pouvant contenir plusieurs types cylindriques 1D.

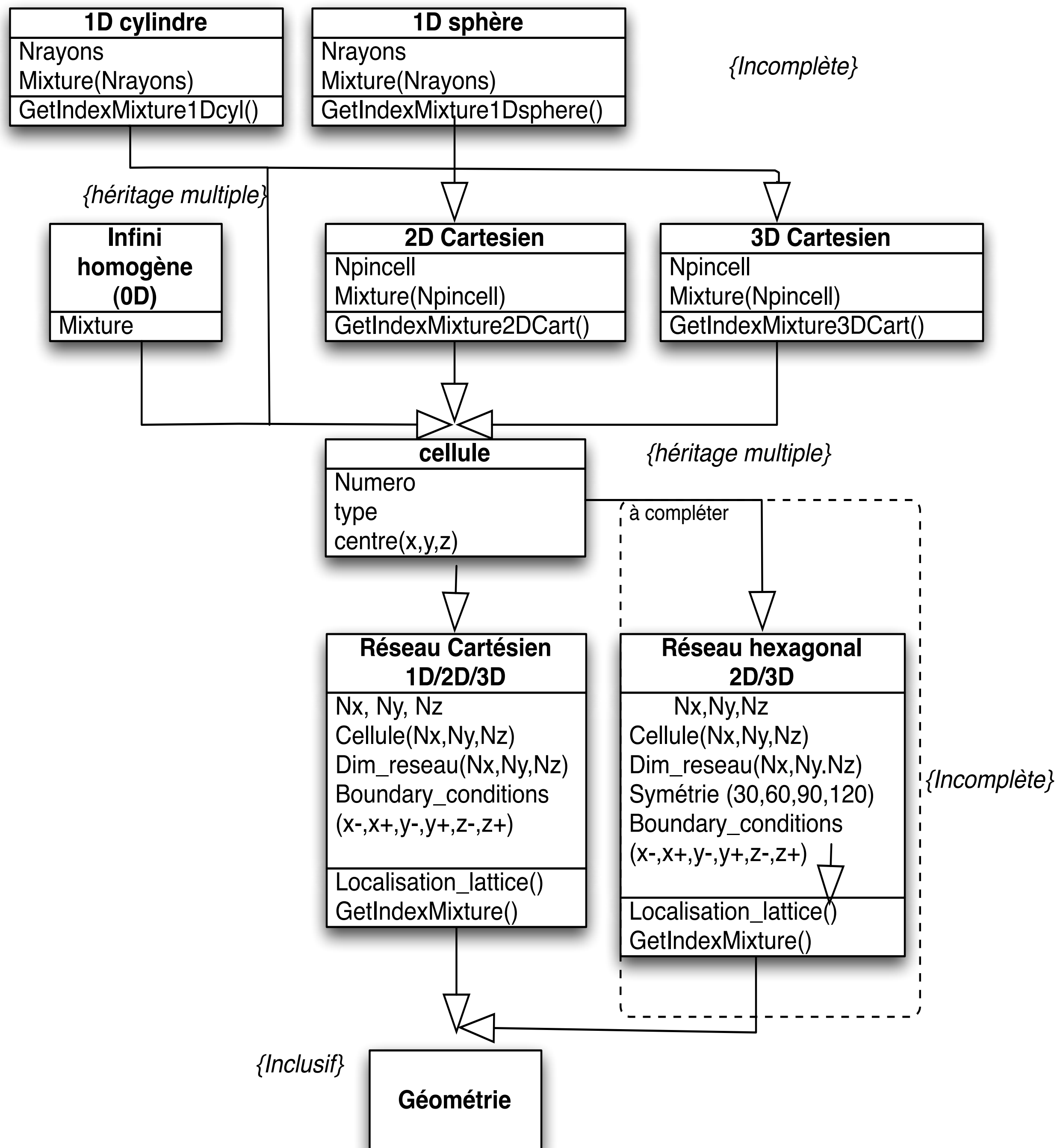


Figure 5.1 Diagrammes de classes géométriques

La classe *cellule* peut s'écrire ainsi

```
type cellule
 ! cell level. contains previously defined derived types.
character (len=10) :: type
double precision   :: center(3)
type(inf)          :: inf
type(pin)          :: pin
type(sphere)       :: sphere
type(car1d)        :: car1d
type(car2d)        :: car2d
type(car3d)        :: car3d
end type cellule
```

Le cas Cartésien 2D est défini suivant

```
! 2d cartesian geometry. can contain pincells
type car2d
integer  :: mix
logical  :: pincell
type(pin):: pin
logical  :: cyl_cluster
integer  :: nbcluster
type(cluster),dimension(:),allocatable :: cluster
end type car2d
```

Et le cas PINCELL (cylindre 1D) :

```
! pincell (concentric cylinders)
type pin
integer :: npin
double precision,dimension(:),allocatable :: rpin
integer,dimension(:),allocatable :: mix
endtype pin
```

On accède par exemple au rayon du cylindre *ipin* de la cellule *icell* via l'instruction

```
cell(icell)%car2d%pin%rpin(ipin)
```

L'algorithme de poursuite neutronique est relativement simple :

1. Localisation du neutron dans le réseau : indice de la cellule
2. Changement de repère : passage dans le référentiel réseau au référentiel cellule
3. Dépendamment du type de cellule (CAR2D, CAR3D), localisation du milieu dans lequel le neutron se trouve.

A titre d'exemple, pour le cas classique d'une cellule REP, les méthodes de localisation du neutron sont triviales :

```
x=pos(1);  y=pos(2);  z=pos(3)
npin=cell(icell)%car2d%pin%npin
r=(x-center(1))**2+(y-center(2))**2
r=sqrt(r);  rpin_max=cell(icell)%car2d%pin%rpin(npin)
if (r>= rpin_max) then
ireg=geo_info%lattice_xyz%reg(ix,iy,iz)%reg_num
  else
  id_pin: do ipin=1,npin
        rpin=cell(icell)%car2d%pin%rpin(ipin)
        if (r <= rpin) then
           ireg=geo_info%lattice_xyz%reg(ix,iy,iz)%pin_num(ipin)
           exit id_pin
        endif
  enddo id_pin
endif
```

Il est important de spécifier que le travail réalisé ici est très limité et ne constitue qu'une fraction des capacités des codes Monte Carlo matures développés par les laboratoires nationaux américains ou européens. Les capacités géométriques se sont révélées néanmoins suffisantes pour démontrer la fiabilité des modèles mathématiques proposés dans cette thèse. Par ailleurs, l'utilisation croissante des outils stochastiques en transport de particules rend de plus en plus nécessaire la définition de modèles géométriques standards. Plusieurs laboratoires comme ORNL aux Etats-Unis ou le CEA en France planchent sur l'utilisation directe de maillages CAD au sein d'outils Monte Carlo. Une autre approche particulièrement intéressante serait de récupérer le moteur géométrique du code GEANT4, le code Monte Carlo pour le transport de particules du CERN. On pourrait envisager notamment un interfaçage via le système ROOT afin de favoriser les étapes de pré et post-traitements.

CHAPITRE 6

PREMIÈRE VALIDATION : UTILISATION DES POIDS CORRÉLÉS

Ce chapitre présente la méthodologie de validation retenue pour tester l'approche Monte Carlo avec tables de probabilité implantée au sein du module `MC:`. On détaille en particulier les méthodes utilisées comme référence, typiquement la méthode Monte Carlo à énergie continue du code SERPENT (Leppänen, 2010b), et le schéma de calcul déterministe architecturé autour de la méthode des probabilités de collision du code de réseau DRAGON (Marleau *et al.*, 1992, 2006). Les résultats obtenus lors de la phase de vérification du code seront ensuite discutés. Les benchmarks sélectionnés sont des cas typiques en calcul de réseau : cellule de Rowlands, cellule CANDU-6 et assemblages REP (UOX et MOX).

Les résultats détaillés dans ce chapitre sont essentiellement tirés de l'article (Martin et Hébert, 2011a) et des publications de conférence (Martin et Hébert, 2010a,b).

6.1 Le code de physique des réacteurs SERPENT

SERPENT est un code Monte Carlo à énergie continue utilisant en entrée des librairies de sections efficaces ponctuelles au format ACE (*A Compact ENDF*). Il est développé au centre de recherche finlandais VTT et constitue à ce jour un des rares codes Monte Carlo spécifiquement conçu pour le calcul de réseau. Il possède à ce titre un solveur des équations d'évolutions du champ isotopique. Il est par ailleurs capable comme la plupart des codes Monte Carlo de modéliser des géométries 3D arbitraires par combinaison de surfaces. Plusieurs caractéristiques le distinguent des codes de référence MCNP, KENO ou TRIPOLI.

- En premier lieu, l'algorithme de marche aléatoire repose sur une combinaison de la méthode de Woodcock, extrêmement efficace dans le cas de calculs de réacteur, avec la procédure classique de « ray-tracing ». En pratique, la poursuite neutronique s'effectue majoritairement suivant la méthode de Delta-tracking, et bascule sur la procédure régulière lorsque l'efficacité de la méthode d'inversion décroit (voir (Leppänen, 2010a)). Ceci intervient dans les zones où la section efficace d'un milieu est largement supérieure à celles des autres mélanges, due à la présence de poison ou d'absorbant neutronique par exemple. Il est possible de désactiver complètement l'une ou l'autre des procédures de tracking, comme cela sera fait dans le dernier cas où uniquement la méthode de Woodcock sera utilisée afin de comparer les performances du code `MC:`.

- Le code SERPENT utilise également une grille universelle en énergie, ce qui permet également d'améliorer le temps de calcul (Leppänen, 2009). En effet, le nombre de points en énergie peut différer de manière significative d'un isotope à l'autre, et le temps passé lors de l'interpolation en énergie décroit largement lorsque tous les isotopes sont unifiés suivant la même grille. En contrepartie, le coût en mémoire vive augmente, sans pour autant excéder les capacités d'un ordinateur courant.

6.2 Méthode des probabilités de collision

En premier lieu, une vérification à l'interne du code DRAGON est proposée, en utilisant le schéma de calcul de cellule classique basé sur la méthode P_{ij}. Le module `NXT:` est utilisé afin de générer un fichier de tracking de la géométrie d'entrée. Celui-ci sera par la suite utilisé dans le solveur P_{ij} appelé par les modules d'auto-protection et de calcul principal de flux. Une densité de 50 tracks cm^{-1} avec une quadrature azimuthale comprenant 16 angles dans l'intervalle $[0, \frac{\pi}{2}]$ sont utilisées. Les résultats sont de manière générale assez peu sensibles à ces paramètres. Une discrétisation du combustible en 6 couronnes a été appliquée suivant la relation suivante :

$$\{r_1, r_2, r_3, r_4, r_5, r_6\} = \{r\sqrt{\frac{4}{10}}, r\sqrt{\frac{7}{10}}, r\sqrt{\frac{4}{5}}, r\sqrt{\frac{9}{10}}, r\sqrt{\frac{19}{20}}, r\} \ ,$$

avec r rayon du combustible. L'étape d'auto-protection des sections efficaces est effectuée par la méthode des sous-groupes projetées, documentée au chapitre 4. La prise en compte des corrélations entre isotopes est réalisée lorsque les tables de probabilité 2D sont disponibles.

Les calculs d'auto-protection des sections efficaces multigroupes seront notamment réalisées en utilisant *exactement* les mêmes tables de probabilité que dans le cas Monte Carlo. L'utilisation des mêmes données d'entrée nous permettra de discuter en détail de la qualité de la méthode Monte Carlo avec tables de probabilité.

6.3 Bibliothèques d'entrée

La même bibliothèque de sections efficaces issue de l'évaluation JEF2.2 au format DRAGLIB (Hébert et Saygin, 1992) sera utilisée, avec un appel identique au module `LIB:`, réalisant l'interpolation en température des sections efficaces multigroupes et le calcul des tables de probabilité pour les calculs P_{ij} ou Monte Carlo. Dans cette étude, le maillage SHEM–295 est utilisé, avec des tables de probabilité calculées pour les isotopes résonnants dans l'intervalle [4.5 eV, 11.14 KeV].

La qualité des résultats sera discutée à l'aide de solutions obtenues par le code Monte Carlo à énergie continue SERPENT (Leppänen, 2010b). La librairie ACE utilisée dans cette étude a été produite avec les mêmes fichiers PENDF que pour la librairie au format DRAGLIB, ceci dans le but de limiter les sources d'erreur dues à l'utilisation de différentes version de NJOY. Etant donnée que dans cette étude, les réactions de diffusion sont considérées isotropes dans `MC:`, la réaction de diffusion élastique a été modifiée dans SERPENT afin d'être isotrope dans le référentiel du laboratoire (LAB) à toutes les énergies. Les autres réactions telles que la diffusion inélastique et les réactions (n,xn) n'ont pas été modifiées, mais leurs poids est jugé très faible sur ces cas où la thermalisation est importante. La discussion sur le traitement de l'anisotropie dans le cadre d'un algorithme Monte Carlo avec la méthode des sous-groupes est reportée au chapitre 7.

Afin de simplifier les notations par la suite, les résultats Monte Carlo avec tables de probabilité seront dénommés ≪ DRAGON–MC ≫, et ceux obtenus par la méthode P_{ij} ≪ DRAGON–CP ≫.

6.3.1 Méthodologie de validation

Deux valeurs seront comparées entre DRAGON et SERPENT :

- Dans un premier temps, on considère le taux d'absorption macroscopique dans le combustible dans le domaine [4.5 eV, 11.14 KeV]. Cet intervalle correspond aux groupes 56 à 206 avec le maillage SHEM–295, pour lesquels des tables de probabilité sont nécessaires dans le cas d'isotopes résonnants. Les taux de réactions macroscopiques sont obtenus via homogénéisation par région matérielle mais sans condensation en énergie. La différence relative (%) entre les calculs DRAGON (MC ou CP) et SERPENT est calculée pour un groupe g suivant

$$\epsilon(g) = 100 \times \frac{\tau_i^{a,g} - \tau_{\text{ref}}^{a,g}}{\tau_{\text{ref}}^{a,g}} \ .$$

  Par ailleurs, l'erreur moyenne $\bar{\epsilon}$, l'erreur intégrée ϵ^{int} et l'erreur maximale $\epsilon^{\max}$ sont également calculées. Elles sont définies respectivement suivant :

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{150} \sum_{g=56}^{206} |\epsilon(g)| \ ,$$

$$\epsilon^{\text{int}} = \frac{\displaystyle\sum_{g=56}^{206} \left[\tau_i^{a,g} - \tau_{\text{ref}}^{a,g}\right]}{\displaystyle\sum_{g=56}^{206} \tau_{\text{ref}}^{a,g}} \ ,$$

$$\epsilon^{\text{max}} = \max(|\epsilon(g)|); \qquad 56 \leq g \leq 206 \ .$$

où i et ref font référence aux résultats DRAGON (CP ou MC) et SERPENT. Les paramètres des simulations Monte Carlo ont été déterminés de manière à conduire à des erreurs statistiques très faibles. Typiquement, 3000 cycles de 10000 neutrons conduisent à des erreurs statistiques inférieures à 0.05% pour les taux de réactions. Par conséquent, celles-ci ne sont pas reportées sur les figures.

- Enfin, les différences absolues entre les k_∞ calculés par DRAGON (CP or MC) et SERPENT k_∞ ainsi que l'erreur statistique associée sont calculées suivant

$$\delta k_\infty \text{ (pcm)} = k_\infty^{\text{i}} - k_\infty^{\text{ref}} \ ,$$

et

$$\sigma_{\text{comb}} = \sqrt{\sigma_{\text{i}}^2 + \sigma_{\text{ref}}^2} \ .$$

6.4 Benchmarks de Rowlands

Les premiers cas tests sont issus des benchmarks proposés par Rowlands (Rowlands, 1999) et sont représentatifs de cellules REL classiques, à composition UOX ou MOX. Les géométries sont de types 2D telles que représentées à la Figure 6.1. Un calcul à buckling nul, i.e. sans fuites, est réalisé sur chacune de ces cellules, en imposant des conditions de réflexion spéculaire aux frontières du domaine.

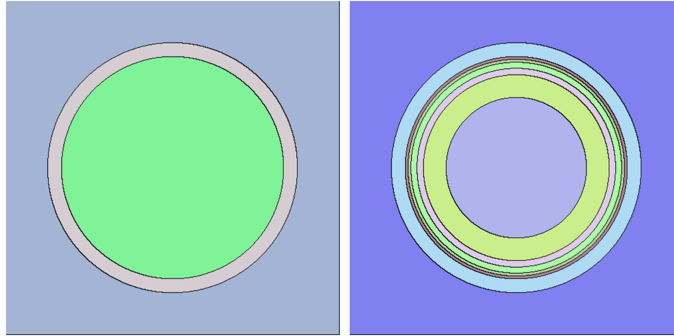


Figure 6.1 Géométries pour les calculs Monte Carlo (gauche) et P_{ij} (droite)

L'objectif principal de cette étude est de tester l'utilisation des tables de probabilité 1D et 2D pour les isotopes corrélés. Les grandeurs comparées seront le coefficient de multiplication infinie (k_∞), ainsi que les taux de réactions par mélange. La voie de calcul basée sur la méthode P_{ij} ainsi que le code Monte Carlo SERPENT seront utilisées afin de générer des solutions pour ces différents cas tests.

6.4.1 Composition isotopique des cas tests

L'étude proposée par Rowlands comporte quatre cas UOX et quatre cas MOX, obtenus en faisant varier la température des milieux et la densité du modérateur. Elle est complétée par deux autres cas, introduits dans (Hébert, 2008) et présentant un large gradient de température au niveau du combustible pour un mélange UOX et MOX. Les 5 cas par mélange chimique sont définis ainsi :

1. UO2-1 : densité nominale du modérateur à 293.6 K, température du combustible et de la gaine à 293 K.
2. UO2-2 : densité réduite du modérateur à 293.6 K, température du combustible et de la gaine à 293 K.
3. UO2-3 : densité réduite du modérateur à 573.6 K, température du combustible à 900 K, gaine à 600 K.
4. UO2-4 : densité réduite du modérateur à 573.6 K, température du combustible et de la gaine à 574 K.
5. UO2-5 : densité réduite du modérateur à 573.6 K, gradient de température dans le combustible (cf Table 6.3), gaine à 600 K.

Et pour les cas MOX :

1. MOX-1 : densité nominale du modérateur à 293.6 K, température du combustible et de la gaine à 300 K.
2. MOX-2 : densité réduite du modérateur à 293.6 K, température du combustible et de la gaine à 300 K.
3. MOX-3 : densité réduite du modérateur à 293.6 K, température du combustible à 560 K, gaine à 300 K.
4. MOX-4 : densité réduite du modérateur à 293.6 K, température du combustible et de la gaine à 300 K.
5. MOX-5 : densité réduite du modérateur à 293.6 K, gradient de température dans le combustible (cf Tables 6.4), gaine à 300 K.

Les températures pour le modérateur ont été sélectionnées à 293.6 K et 573.6 K afin de correspondre aux températures T pour lesquelles les données de thermalisation sont disponibles dans l'évaluation. Les Tables 6.1 et 6.2 indiquent la composition chimique des crayons UOX et MOX. Les isotopes possédant des tables de probabilité sont :

Tableau 6.1 Compositions des benchmarks cellules REL UOX.

		densité nominale		Densité en H_2O réduite	
Mélange	Isotope	Densité (10^{24} atome/cm^3)	Température (K)	Densité (10^{24} atome/cm^3)	Température (K)
combustible	^{235}U	7.0803×10^{-4}	293	7.0803×10^{-4}	293, 574, 900
	^{238}U	2.2604×10^{-2}	293	2.2604×10^{-2}	293, 574, 900
	^{16}O	4.6624×10^{-2}	293	4.6624×10^{-2}	293, 574, 900
gaine	Zr	4.3241×10^{-2}	293	4.3241×10^{-2}	293, 574, 600
modérateur	H_2O	3.3494×10^{-2}	293.6	2.3446×10^{-2}	293.6, 573.6

Tableau 6.2 Compositions des benchmarks cellules REL MOX.

		MOX combustible 1		MOX combustible 2	
Mélange	Isotope	Densité (10^{24} atome/cm^3)	Température (K)	Densité (10^{24} atome/cm^3)	Température (K)
combustible	^{235}U	5.105×10^{-5}	300 ou 560	5.118×10^{-5}	300 ou 560
	^{238}U	2.037×10^{-2}	300 ou 560	2.042×10^{-2}	300 ou 560
	^{238}Pu	4.669×10^{-5}	300 ou 560	2.714×10^{-5}	300 ou 560
	^{239}Pu	1.465×10^{-3}	300 ou 560	2.714×10^{-3}	300 ou 560
	^{240}Pu	5.691×10^{-4}	300 ou 560	1.972×10^{-4}	300 ou 560
	^{241}Pu	2.713×10^{-4}	300 ou 560	4.256×10^{-5}	300 ou 560
	^{242}Pu	1.413×10^{-4}	300 ou 560	3.577×10^{-5}	300 ou 560
	^{241}Am	3.028×10^{-5}	300 ou 560	1.234×10^{-5}	300 ou 560
	^{16}O	4.588×10^{-2}	300 ou 560	4.588×10^{-2}	300 ou 560
gaine	Zr	3.88×10^{-2}	300	3.88×10^{-2}	300
modérateur	H_2O	2.372×10^{-2}	293.6	2.372×10^{-2}	293.6

- Cas UOX : ^{235}U, ^{238}U et Zr.
- Cas MOX : ^{238}U, ^{238}Pu , ^{239}Pu, ^{240}Pu, ^{241}Pu, ^{242}Pu, ^{241}Am et Zr.

La présence d'isotopes variés en font des cas tests idéaux pour les méthodes d'auto-protection, et donc pour la méthode Monte Carlo avec tables de probabilité. Les gradients de température dans le combustible définissant les cas numérotés 5 sont présentés dans les tables 6.3 pour le mélange UO2 et 6.4 pour le MOX.

Tableau 6.3 Gradient de température dans le crayon UOX.

Rayon extérieur (cm)	Mélange	Température (K)
0.2529822	combustible	1200.
0.3346640	combustible	1000.
0.3577709	combustible	800.
0.3794733	combustible	700.
0.3898718	combustible	650.
0.4	combustible	600.
0.45	gaine	600.
0.6770275	modérateur	573.6

Tableau 6.4 Gradient de température dans le crayon MOX.

Rayon extérieur (cm)	Mélange	Température (K)
0.259307	combustible	900.
0.343031	combustible	700.
0.366715	combustible	500.
0.388960	combustible	400.
0.3996186	combustible	350.
0.41	combustible	300.
0.475	gaine	300.
0.710879	modérateur	293.6

6.4.2 Test des types de tables de probabilité

Les résultats produits par la méthode Monte Carlo se sont révélés très sensibles au formalisme numérique utilisé pour calculer les tables de probabilité. Au départ de ce projet, l'approche envisagée était d'utiliser les tables de probabilité calculées par la méthode SPM décrite dans (Hébert, 2008) et rappelée à la section 4.3 du chapitre 4. Dans ce cas, uniquement les points de base pour la section efficace totale sont calculés par la méthode des moments. Un calcul de type Root Mean Square (RMS) est utilisé pour le calcul des points de base pour les sections efficaces partielles, e.g., fission, diffusion et matrice de transfert pour différents ordres de Legendre. La technique numérique repose sur la conservation de taux de réactions calculés dans NJOY pour certaines valeurs de dilution. Cette méthode, très efficace pour les

méthodes d'auto-protection du module `USS:`, conduisait néanmoins à un biais systématique lorsqu'utilisé dans le code `MC:`.

Afin de résoudre ce problème, le formalisme CALENDF a été généralisé au calcul des sections efficaces partielles. Il a fallu modifier en amont le module DRAGR afin que les données nécessaires (les sections efficaces ponctuelles des réactions partielles) soient elles aussi stockées. La seule différence entre ces deux approches est donc la méthode de calcul invoquée lors de la détermination des tables de probabilité pour les réactions partielles. Pour illustrer ce problème, les taux d'absorption pour le combustible ont été calculés pour le cas MOX-1 dans les deux cas. Les résultats affichés à la Figure 6.2 et résumés dans le tableau 6.5 démontrent une amélioration des résultats lorsque la méthode CALENDF est appliquée pour toutes les réactions. Différents tests numériques ont confirmé ce phénomène, et la conclusion est que

Tableau 6.5 Test des types de tables de probabilité, cas MOX-1

	DRAGON–MC		DRAGON–CP	
	SPM	CALENDF	SPM	CALENDF
k_∞ (δk_∞ pcm)	1.21753 (-750)	1.22640 (151)	1.22453 (-52)	1.22503 (-2)
$\bar{\epsilon}$ (%)	2.20	1.50	1.31	1.38
ϵ^{int} (%)	0.44	-0.07	0.62	0.42
ϵ^{max} (%)	16.5	11.09	9.78	9.60

l'approche RMS peut échouer pour certaines réactions dans un nombre limité de groupes. Dans certains groupes résonnants, des points de base pour les réactions partielles peuvent devenir légèrement négatifs. Ceci ne cause aucun problème dans le cas des méthodes d'auto-protection du module `USS:`, où uniquement la section efficace de diffusion P_0 est calculé par une approche RMS. Les autres sections efficaces partielles n'interviennent pas dans la résolution des équations des sous-groupes.

La supériorité de la méthode des moments vis-à-vis d'autres techniques de détermination des tables de probabilité n'est pas une découverte. Les travaux initiaux de Ribon et de Cullen font déjà état de l'amélioration introduite par la méthode des moments comparativement à d'autres techniques (RMS, équiprobables par exemple) sur des problèmes de transport analytiques (Ribon et Maillard, 1986; Cullen, 1980).

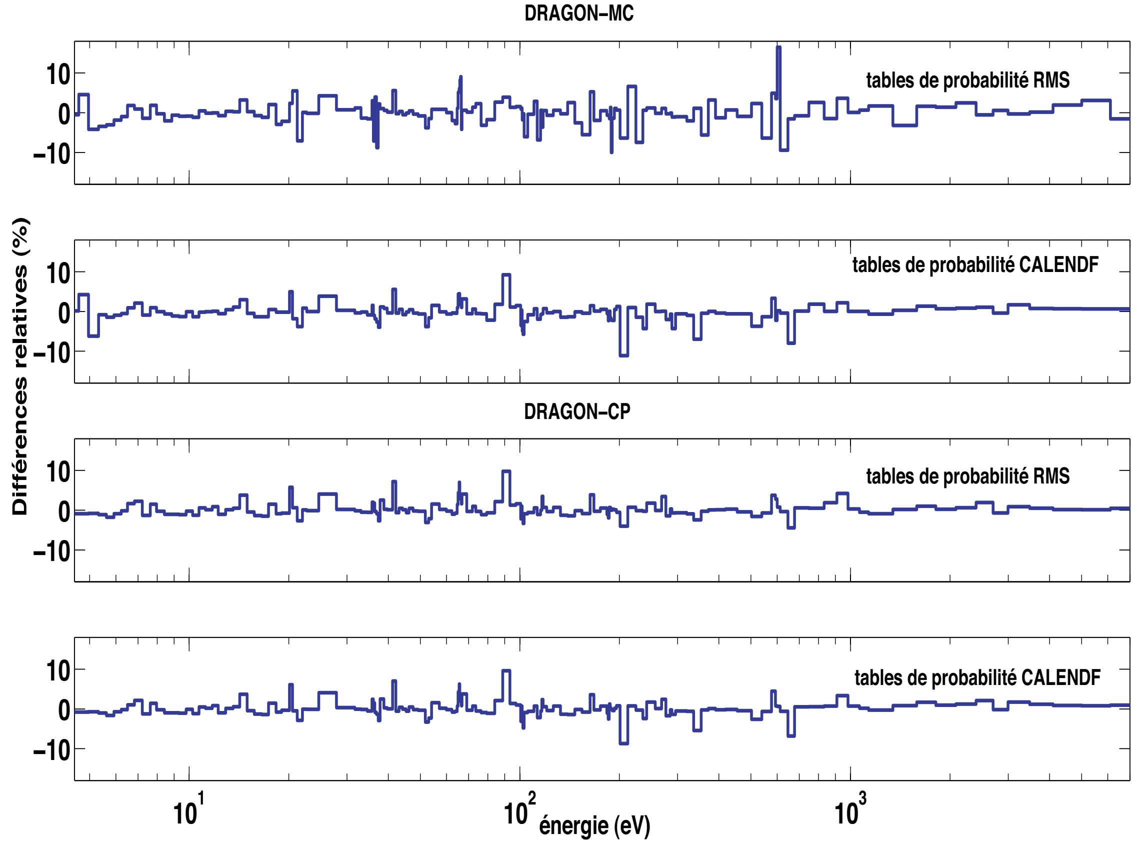


Figure 6.2 Comparaison des taux de réactions

6.4.3 Comparaison des k_∞

Les k_∞ obtenus par les calculs DRAGON–MC et DRAGON–CP pour les tables de probabilité 1D et 2D sont respectivement donnés aux Tableaux 6.6 and 6.7. De manière générale, on remarque que les résultats fournis par le code DRAGON sont en concordance avec ceux obtenus par SERPENT. Les différences absolues sont inférieures à 200 pcm sauf pour les cas avec gradient de température. L'introduction des poids corrélés engendre une réduction des différences de l'ordre de 100 pcm. On démontre ici l'amélioration apportée par les poids corrélés dans un code Monte Carlo, même si cet impact reste relativement mineur de manière générale. Ceci s'explique simplement par le fait que les effets d'interférence sont en grande partie résolus de par la structure même du maillage SHEM.

Tableau 6.6 k_∞ avec tables de probabilité 1D

	DRAGON–MC		DRAGON–CP		SERPENT
Cas	k_∞ (σ)	δk_∞ vs. SERPENT (σ_{comb})	k_∞ (σ)	δk_∞ vs. SERPENT (σ_{comb})	k_∞ (σ)
UO2-1	1.39094 (12)	-19 (17)	1.39135	22 (12)	1.39113 (12)
UO2-2	1.34058 (12)	40 (17)	1.33967	-51 (12)	1.34018 (12)
UO2-3	1.31049 (12)	144 (17)	1.30907	-2 (12)	1.30905 (12)
UO2-4	1.32337 (12)	123 (17)	1.32203	-11 (12)	1.32214 (12)
UO2-5	1.30801 (12)	-87 (12)	1.30811	97 (12)	1.30714 (12)
MOX-1	1.22656 (14)	151 (18)	1.22503	-2 (12)	1.22505 (12)
MOX-2	1.21293 (14)	167 (18)	1.21092	-34 (12)	1.21126 (12)
MOX-3	1.26874 (14)	144 (18)	1.26734	4 (12)	1.26730 (12)
MOX-4	1.25549 (14)	236 (18)	1.25408	95 (12)	1.25313 (12)
MOX-5	1.20786 (14)	315 (18)	1.20739	268 (12)	1.20471 (12)

Tableau 6.7 k_∞ avec tables de probabilité 2D

	DRAGON–MC		DRAGON–CP		SERPENT
Cas	k_∞ (σ)	δk_∞ vs. SERPENT (σ_{comb})	k_∞ (σ)	δk_∞ vs. SERPENT (σ_{comb})	k_∞ (σ)
UO2-1	1.39021 (12)	-92 (12)	1.39131	18 (12)	1.39113 (12)
UO2-2	1.33979 (12)	-39 (17)	1.33963	-55 (12)	1.34018 (12)
UO2-3	1.31085 (12)	180 (17)	1.30911	6 (12)	1.30905 (12)
UO2-4	1.32311 (12)	97 (17)	1.32202	12 (12)	1.32214 (12)
UO2-5	1.30671 (12)	-43 (12)	1.30705	-9 (12)	1.30714 (12)
MOX-1	1.22604 (14)	99 (18)	1.22527	22 (12)	1.22505 (12)
MOX-2	1.21197 (14)	71 (18)	1.21130	4 (12)	1.21126 (12)
MOX-3	1.26830 (14)	-100 (18)	1.26780	50 (12)	1.26730 (12)
MOX-4	1.25472 (14)	159 (18)	1.25470	152 (12)	1.25313 (12)
MOX-5	1.20711 (14)	240 (18)	1.20693	222 (12)	1.20471 (12)

6.4.4 Comparaison des taux d'absorption

Les différences relatives pour les taux d'absorption sont affichées à la figure 6.3, pour les deux types de tables de probabilité. On remarque premièrement que les résultats Monte Carlo présentent des erreurs relatives très semblables aux cas déterministes. Les erreurs moyennes, intégrées et maximales données dans le tableau 6.8 démontrent l'amélioration des résultats dans le cas d'un calcul avec poids corrélés. Ce résultat, initialement démontré pour les méthodes d'auto-protection (voir (Hébert, 2005; Hébert, 2008)) est ici généralisé au cas stochastique. Cependant, le niveau d'amélioration n'est pas exactement le même dans les deux cas.

Tableau 6.8 Erreurs pour les taux d'absorption

	PT 1D		PT 2D	
	DRAGON–MC	DRAGON–CP	DRAGON–MC	DRAGON–CP
$\bar{\epsilon}$ (%)	1.50	1.40	1.45	0.96
ϵ^{int} (%)	-0.07	0.42	0.02	0.24
ϵ^{max} (%)	11.09	9.60	8.55	4.67

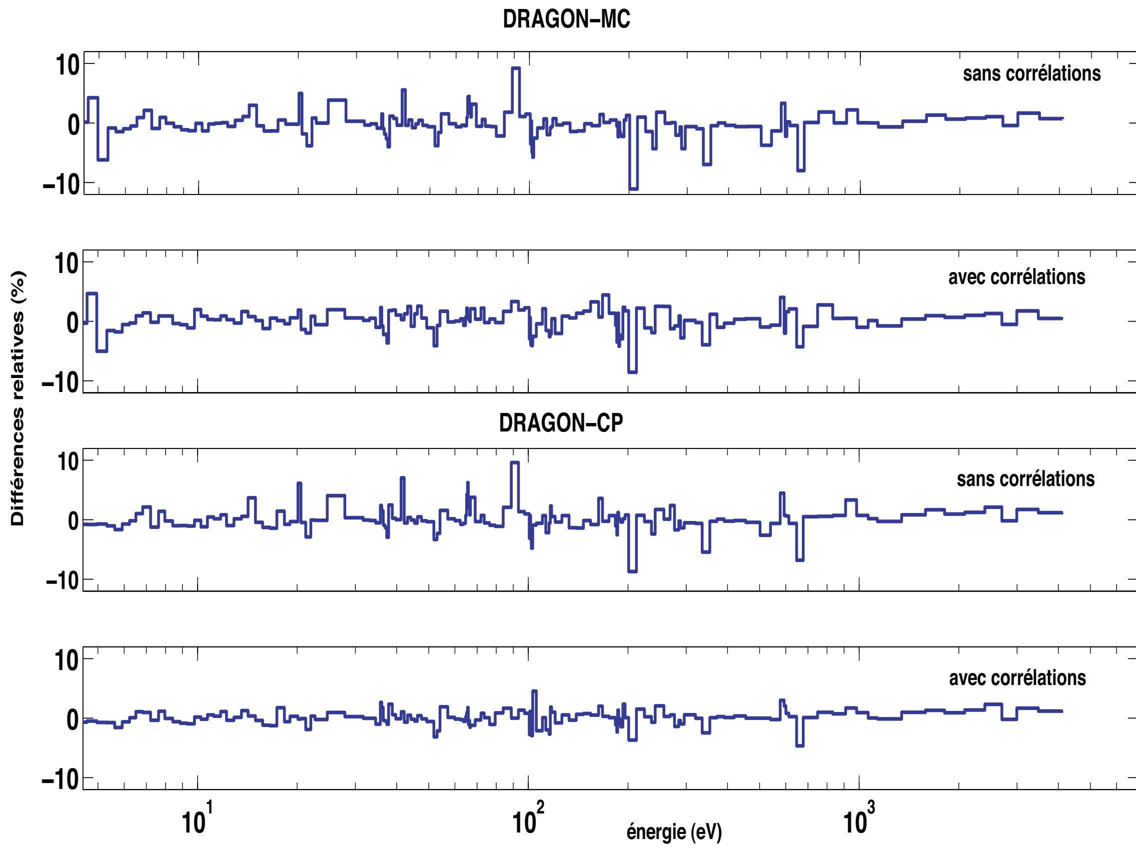


Figure 6.3 Différences relatives pour les taux d'absorption dans le combustible

Pour les calculs basés sur la méthode des probabilités de collision, l'utilisation des poids corrélés diminuent pratiquement d'un facteur 2 l'erreur relative maximale (9.60 à 4.67 %). Dans le cas Monte Carlo, l'impact est de 2% (11.09 à 8.55%). Encore une fois, cette différence est reliée à la précision numérique de ces tables de probabilité 2D. Quand la table de probabilité atteint un ordre important (9 ou 10 par exemple), le calcul des poids corrélés peut

introduire des poids légèrement négatifs. Ceci apparaît uniquement pour quelques isotopes (essentiellement ^{238}U) et dans un très faible nombre de groupe. Plusieurs techniques de normalisation ont été introduites dans le cas Monte Carlo, mais sans pour autant réussir à réduire cette source d'erreur. Ceci explique pourquoi l'erreur maximale reste du même ordre de grandeur dans le cas Monte Carlo. A noter que la présence de poids négatifs n'a pratiquement aucun impact dans le cadre d'algorithme déterministe. Dans tous les cas, l'erreur intégrée ϵ^{int} est très faible : 0.07% dans le cas 1D, et 0.02% dans le cas 2D. Ceci justifie également le fait que l'erreur maximale est localisée dans des groupes de faible importance.

6.5 Assemblage CANDU

Ce cas est dérivé d'un test de non-regression du code DRAGON. Les caractéristiques géométriques illustrées à la figure 6.4 sont les suivantes : un pas de réseau de 28.575 cm, cluster cylindrique de 37 crayons de combustible, avec de l'eau lourde comme caloporteur, entouré respectivement des tubes de pression, de l'hélium, des tubes de calandre et finalement de l'eau lourde comme modérateur. La composition isotopique est définie au tableau 6.9.

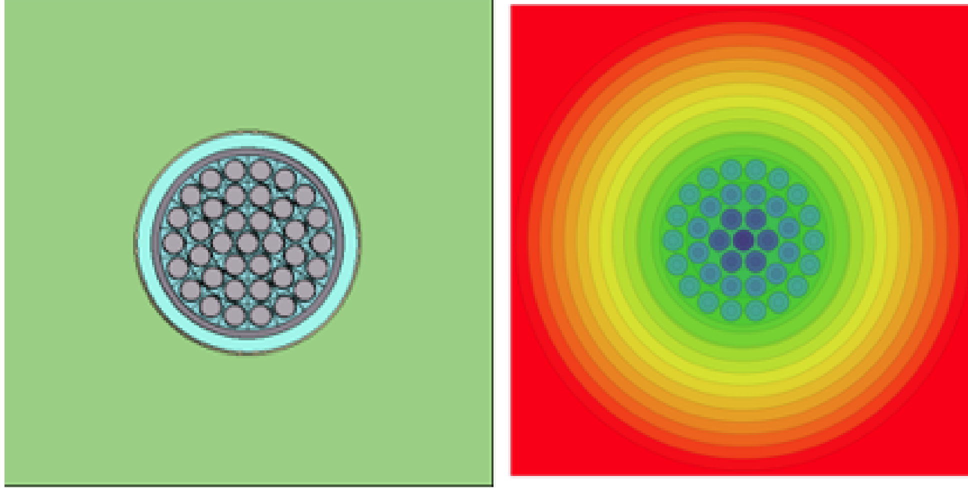


Figure 6.4 Géométries pour les calculs Monte Carlo (gauche) et P_{ij} (droite)

L'étude réalisée ici est une évaluation classique du coefficient de réactivité du vide (CVR). Deux calculs de réseau sans fuites sont réalisés avec des conditions de translation aux frontières, avec ou sans caloporteur. Deux voies de calculs sont comparées :

- DRAGON–CP : méthode des probabilités de collision.
- DRAGON–MC : méthode Monte Carlo avec tables de probabilité.

Tableau 6.9 Composition isotopique de la cellule CANDU-6.

Mélange	Isotope	Densité (10^{24} atom/cm^3)	Température (K)
combustible	$^{\mathbf{235}}$**U**	1.6771×10^{-4}	941.3
	$^{\mathbf{238}}$**U**	2.3111×10^{-2}	941.3
	^{16}O	4.6557×10^{-2}	941.3
gaine	^{56}Fe	1.1089×10^{-4}	550.6
	^{58}Ni	4.0148×10^{-5}	550.6
	^{52}Cr	8.2102×10^{-5}	550.6
	^{11}B	1.0916×10^{-6}	550.6
	Zr	4.2521×10^{-2}	550.6
caloporteur	^{16}O	2.4444×10^{-2}	550.6
	^{2}H	4.8508×10^{-2}	550.6
	H	3.8034×10^{-4}	550.6
Tube de pression	^{93}Nb	1.0647×10^{-3}	550.6
	^{11}B	7.5470×10^{-7}	550.6
	Zr	4.2435×10^{-2}	550.6
Gap Helium	^{4}He	2.1064×10^{-4}	550.6
calandre	^{56}Fe	1.1089×10^{-4}	345.6
	^{58}Ni	4.0148×10^{-5}	345.6
	^{52}Cr	8.2102×10^{-5}	345.6
	^{11}B	1.0916×10^{-6}	345.6
	Zr	4.2521×10^{-2}	345.6
modérateur	^{16}O	3.2572×10^{-2}	345.6
	^{2}H	6.5085×10^{-2}	345.6
	H	5.7977×10^{-5}	345.6

Le CVR est ensuite évalué suivant

$$\rho_{CVR} = \left(\frac{1}{k_\infty^{full}} - \frac{1}{k_\infty^{void}} \right) .$$

où k_∞^{full} correspond à la cellule avec caloporteur, tandis que k_{eff}^{void} à la cellule vidangée. Dans le cas des calculs Monte Carlo, l'écart-type associé à chaque k_{eff} (supposé indépendants) peut être combiné via

$$\sigma_{CVR} = \sqrt{\frac{(\sigma^{full})^2}{(k_\infty^{full})^4} + \frac{(\sigma^{void})^2}{(k_\infty^{void})^4}} .$$

Dans le cas du code DRAGON (CP ou MC), la librairie d'entrée comprend 295 groupes (SHEM–295 g) au format Draglib et est basée sur l'évaluation JEFF3.1. Des tables de pro-

babilité seront calculés pour 3 isotopes : ^{235}U, ^{238}U et Zr entre 4.6 eV et 11.14 KeV.

Comme précédemment, l'étape d'auto-protection des résonances est réalisée par une méthode des sous-groupes utilisant exactement les mêmes tables de probabilité (CALENDF) que pour le module `MC:`. La méthode des probabilités de collision est utilisée, avec une densité de 50 lignes/cm et une quadrature azimuthale de 12 angles $\in [0, \frac{\pi}{2}]$ pour l'opérateur de tracking `NXT:`. Pour le calcul de flux principal, les mêmes options sont utilisées, avec cette fois-ci une discrétisation en 6 et 10 anneaux pour le caloporteur et le modérateur, respectivement, ainsi qu'une subdivision en deux pour les crayons de combustible. Une correction de transport P_0 de type APOLLO est utilisé pour la diffusion dans le cas de la méthode des probabilités de collision.

Tableau 6.10 k_∞ pour une cellule CANDU-6

	DRAGON–CP	DRAGON–MC
k_∞ cellule pleine	1.12559	1.25931 ± 0.0003
k_∞ cellule vide	1.14699	1.14712 ± 0.0003
ρ_{CVR}	1660 pcm	1640 ± 23 pcm

Les résultats affichés au tableau 6.10 démontrent la concordance entre les deux méthodes numériques lors de l'évaluation du k_∞ et du ρ_{CVR}. Les différences pour le coefficient de réactivité du vide entre DRAGON–MC and DRAGON–CP sont typiquement en dessous de 2σ.

6.6 Assemblage REP UOX

Ce benchmark est proposé afin de démontrer la faisabilité de la méthode Monte Carlo avec tables de probabilité dans une configuration plus complexe que les deux précédentes. Le but est de démontrer la possibilité de combiner un algorithme Monte Carlo reposant sur la méthode de Woodcock avec un formalisme de tables de probabilité dans le cas de plusieurs centaines de régions résonnantes. On rappelle par ailleurs que le tirage des tables de probabilité n'intervient que dans le cas des isotopes résonnants dans les groupes résonnants (56 à 206 dans le maillage SHEM–295).

Pour cela, un cas issu de la base de validation du code SERPENT a été sélectionné. Il s'agit d'un assemble REP comportant 17×17 crayons de combustibles, tel qu'illustré à la figure 6.5. Des conditions de réflexion périodique sont appliquées dans ce cas.

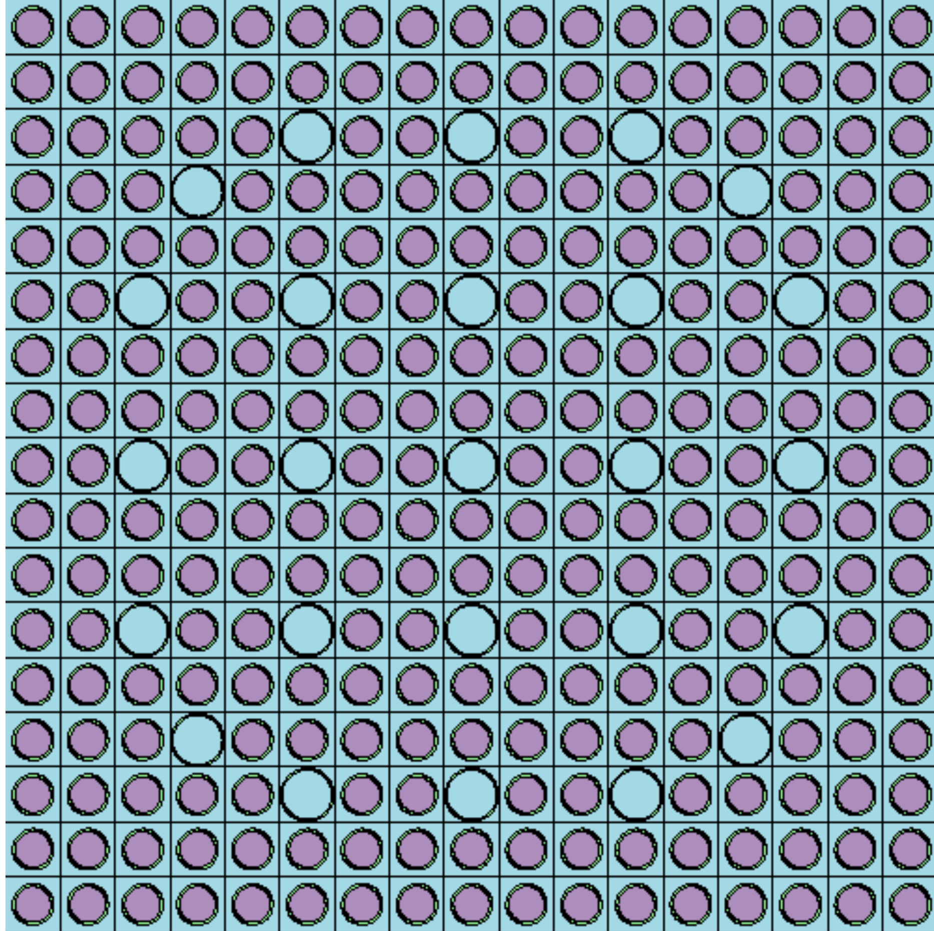


Figure 6.5 Assemblage UOX REP

La composition du combustible, indiquée au tableau 6.11 est représentative de celle d'un assemblage UOX initialement enrichi à 3.25% et qui aurait évolué jusqu'à un burnup moyen de 25MWj/KgU. Les isotopes ayant des tables de probabilité dans les groupes résonnants sont notés en gras. Il est intéressant de noter la présence de 50 ppm de Bore dilué dans le modérateur, ce qui vient limiter l'efficacité de la méthode de delta-tracking utilisée dans `MC:` et dans SERPENT. Les librairies utilisées dans cette étude sont basées sur l'évaluation JEFF3.1. L'anisotropie de la diffusion est considérée via une correction de transport dans le cas du code `MC:`.

Tableau 6.11 Composition isotopique de l'assemblage REP UOX : enrichissement initial de 3.25%, burnup à 25 MWj/KgU

Mélange	Isotope	Densité (10^{24} atom/cm^3)	Température (K)
combustible	**^{235}U**	3.000×10^{-4}	900
	^{236}U	8.000×10^{-5}	900
	^{238}U	2.000×10^{-2}	900
	^{237}Np	7.100×10^{-6}	900
	^{238}Pu	1.700×10^{-6}	900
	^{239}Pu	1.200×10^{-4}	900
	^{240}Pu	3.800×10^{-5}	900
	^{241}Pu	2.100×10^{-5}	900
	^{242}Pu	5.300×10^{-6}	900
	^{241}Am	4.200×10^{-7}	900
	^{131}Xe	1.400×10^{-5}	900
	^{135}Xe	8.000×10^{-9}	900
	^{153}Eu	2.800×10^{-6}	900
	^{149}Sm	9.000×10^{-8}	900
	^{103}Ru	1.800×10^{-5}	900
	^{143}Nd	2.500×10^{-5}	900
	^{133}Cs	3.500×10^{-5}	900
	^{155}Gd	8.400×10^{-10}	900
	^{99}Tc	3.200×10^{-5}	900
	^{99}Mo	3.200×10^{-5}	900
	^{147}Pm	6.400×10^{-6}	900
	^{150}Sm	7.500×10^{-6}	900
	^{151}Sm	4.100×10^{-7}	900
	^{152}Sm	3.200×10^{-6}	900
	^{16}O	4.510×10^{-2}	900
Gaine	**Zr**	3.955×10^{-2}	600
	^{56}Fe	1.383×10^{-4}	600
	^{52}Cr	7.072×10^{-5}	600
	^{16}O	2.874×10^{-4}	600
modérateur	H_2O	2.362×10^{-2}	573.6
	^{10}B	4.321×10^{-6}	573.6
	^{11}B	1.739×10^{-5}	573.6

Les grandeurs comparées entre DRAGON–MC et SERPENT sont dans ce cas le facteur de multiplication k_∞ ainsi que le flux intégré homogénéisé par crayon et condensé à deux groupes, un rapide et un thermique (limite imposée à 0.625 eV). Les figures de mérite des deux codes sont également comparées. Celles-ci sont évaluées suivant

$$\text{FOM} = \frac{1}{T(\frac{\sigma(k_\infty)}{k_\infty})^2} \ ,$$

avec T la durée totale du calcul en minutes et $\sigma(k_\infty)$ l'écart-type associé au k_∞. Les calculs ont été réalisés sur le même processeur Intel Xeon® cadencé à 3.00 GHz, avec exactement les mêmes paramètres de simulation : 1050 cycles de 10000 neutrons, (50 premiers inactifs).

Les écarts relatifs entre `MC:` et SERPENT sont représentés aux figures 6.6 et 6.7 dans le cas de tables de probabilité 1D et 2D, respectivement. Il n'y a pas de différences significatives entre les deux cas, les différences étant typiquement inférieures à 1% pour le flux thermique. Dans le cas du flux rapide, les écarts sont légèrement plus importants, avec une différence relative entre 1 et 2% et un maximum de 6% pour les trous d'eau. Ceci est essentiellement relié à l'incohérence du traitement de l'anisotropie de la diffusion et n'est pas relié au formalisme des tables de probabilité. De plus, le spectre est majoritairement thermique dans le cas d'un assemblage REP.

Tableau 6.12 Assemblage REP UOX

	DRAGON–MC		SERPENT
Tables de probabilité	1D	2D	-
k_{eff} (σ)	1.03868 (39)	1.03832 (40)	1.037772 (40)
δk_{eff} vs. SERPENT σ_{comb}	96 (56)	60 (56)	-
Temps CPU (min)	15.1	15.2	15.6
FOM	183.2	177.3	172.6

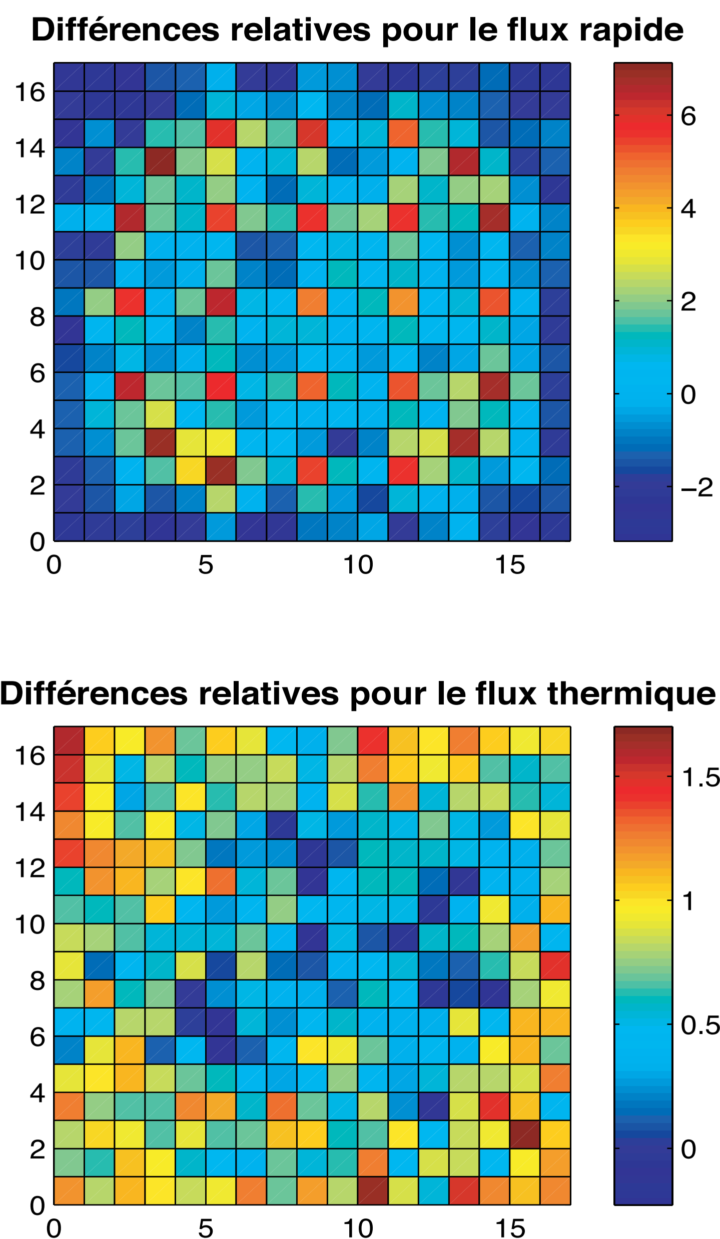


Figure 6.6 Différences relatives pour le flux intégré (sans corrélations)

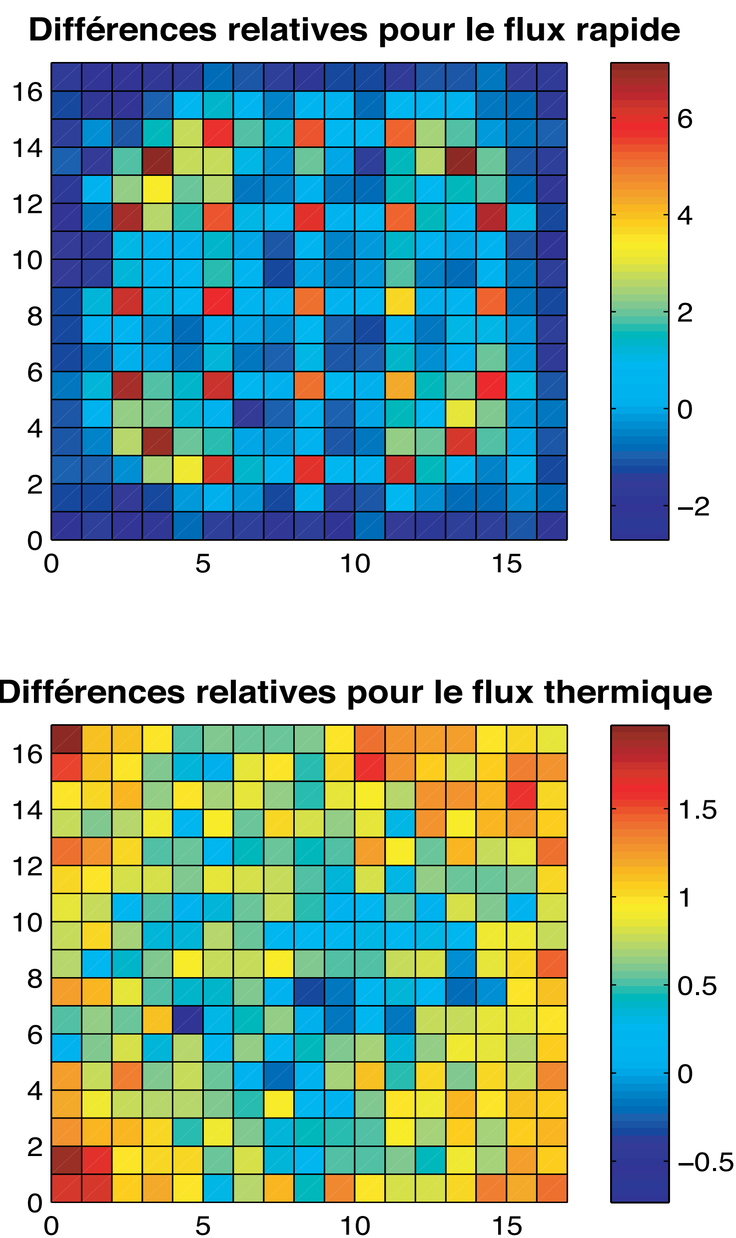


Figure 6.7 Différences relatives pour le flux intégré (corrélations activées)

Les k_{eff} affichés au tableau 6.12 sont cohérents entre les deux codes. L'utilisation de poids corrélés permet une diminution des écarts absolus de l'ordre de 40 pcm. Enfin, le temps de calcul est similaire entre les deux codes. Ceci est important étant donné le grand nombre d'isotopes résonnants présents dans ce cas test. Ces résultats sont néanmoins préliminaires et il est légitime de supposer que le temps de calcul peut être encore optimisé, typiquement par amélioration du code de `MC:`.

Il est par ailleurs clair qu'un algorithme de tracking uniquement basé sur Woodcock n'est pas optimal dans le cas où des poisons neutroniques sont présents. Dans ces cas, il suffirait de suivre la méthode du code SERPENT et de passer de la méthode de Woodcock à une méthode de ray-tracking régulière. Une autre approche serait la possibilité d'assigner une méthode de tracking différente par volume ou région considérée, comme le propose le code MORET.

CHAPITRE 7

REPRÉSENTATION DE L'ANISOTROPIE DE LA DIFFUSION

7.1 Introduction

Tenir compte de l'anisotropie de la diffusion est un sujet difficile dans les cas d'un algorithme Monte Carlo utilisant des données multigroupes en entrée. Cette difficulté persiste avec l'utilisation de tables de probabilité, et relève essentiellement de l'utilisation de moments de Legendre pour la section efficace de diffusion. En effet dans l'approche usuelle, les sections efficaces de diffusion sont accessibles sous la forme d'une série de Legendre tronquée à l'ordre L :

$$\sigma_s(E' \leftarrow E, \mu) = \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{2} \sigma_{s,\ell}(E' \leftarrow E) P_\ell(\mu) \ , \tag{7.1}$$

avec

$$\sigma_{s,\ell}(E' \leftarrow E) = \int_{-1}^{1} d\mu \sigma_s(E' \leftarrow E, \mu) P_\ell(\mu) \ . \tag{7.2}$$

Ici, poser $L = 0$ ou $L = 1$ correspond à considérer la diffusion isotrope ou linéairement anisotrope dans le référentiel LAB. La représentation en polynômes de Legendre de la section efficace de diffusion a été historiquement introduite dans le code NJOY et son module GROUPR car elle était directement utilisable dans les codes de transport S_N. Ce n'est pas le cas pour les codes Monte Carlo multigroupes, où les données initiales doivent être retranscrites dans un formalisme adéquat.

En premier lieu, il est important de constater que les réactions de diffusion ne peuvent être que très rarement considérées uniquement isotropes dans le référentiel LAB. Ainsi, si en physique des réacteurs un calcul avec des sections efficaces de diffusion corrigées transport (P_{0TR}) ou linéairement anisotrope (P_1) est suffisant pour modéliser un assemblage REP ou CANDU, dans les cas plus complexes (assemblages BWR, SFR) il est parfois nécessaire de monter jusqu'à un ordre plus élevé (P_3 ou P_5).

En criticité, certaines configurations peuvent présenter des cas plus problématiques, notamment les milieux à spectres rapides, peu modérés, fortement réfléchis. Les bibliothèques du code APOLLO2 dans la chaîne de calcul CRISTAL peuvent ainsi contenir des sections efficaces de diffusion développées jusqu'à l'ordre P_9. Il est donc primordial de pouvoir tenir compte de toute l'information présente dans les librairies d'entrée dans un code de transport

applicable au calcul de criticité.

Un des objectifs de cette étude étant de pouvoir tester la méthode Monte Carlo avec sous-groupe sur des configurations de criticité, il a été nécessaire de s'intéresser à cette problématique. Grâce à un échange avec l'équipe du SEC/LERD de l'IRSN, toutes les techniques utilisées dans le code MORET pour tenir compte de l'anisotropie de la loi de choc dans le cas de sections efficaces macroscopiques par groupe ont été adaptées au cas microscopique avec tables de probabilité. La méthode dite des *angles discrets* (notée usuellement D.A.T. pour *Discrete Angle Technique*) est en ce sens très intéressante, car elle permet de transcrire toute l'information contenue dans la librairie d'entrée (i.e., sections efficaces de transfert développées à un ordre arbitraire L) en fournissant quelques valeurs discrètes pour μ en fonction du couple (E,E'). L'idée générale est la préservation des moments associés à la densité de probabilité du cosinus de diffusion, typiquement par application de la méthode CALENDF.

D'autres méthodes basées également sur la conservation des moments existent, notamment celles reposant sur une représentation en escaliers, équiprobables ou non (Li, 1998). Des techniques semi-analytiques existent dans le cas de lois de diffusion basées sur des ordres faibles (P_1 ou P_3), connues sous le nom de méthode de Coveyou et de Lux, respectivement. Ces méthodes ont notamment été implantées dans `MC:` afin de tenir compte de l'anisotropie de la diffusion lorsque l'on ne dispose que de lois d'anisotropie développées à des ordres faibles.

Après quelques rappels généraux, nous présenterons le traitement de l'anisotropie dans le cas à énergie continue puis dans le cas multigroupe. Enfin, nous montrerons comment l'approche D.A.T. a été généralisée à la représentation des sections efficaces par tables de probabilité.

7.2 Quelques rappels

Une discussion complète de la cinématique de la collision neutron/noyau peut être trouvée à la référence (Hébert, 2009), tandis que la modélisation de l'anisotropie de la diffusion pour la méthode Monte Carlo multigroupe a été étudiée à l'IRSN par A. Lecocq (Le Cocq, 1998).

L'article de Brockmman synthétise les techniques de modélisations de l'anisotropie de la diffusion dans le cadre du transport de neutrons (Brockmann, 1981), à la fois pour les méthodes déterministes ou Monte Carlo. La thèse de Li (Li, 1998) détaille l'approche par paliers non équiprobables applicable aux codes Monte Carlo multigroupes.

Ici, nous nous contenterons de présenter l'essentiel nécessaire à la compréhension du traitement implanté dans DRAGON au sein du module `MC:`, soit la méthode D.A.T. ainsi que les techniques semi-analytiques de Coveyou et de Lux.

La réaction de diffusion se sépare en deux types : élastique, ou inélastique. Les réactions inélastiques peuvent également se décliner en réactions (n,xn), avec n=2,3 ou 4 typiquement. On rappelle que dans le cas de matériaux supposés isotropes, la section efficace macroscopique de diffusion s'écrit :

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \leftarrow E, \mathbf{\Omega}' \leftarrow \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{2\pi}\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \leftarrow E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}) \ .$$

On note généralement $\mu = \mu_{LAB} = \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}$ le cosinus de l'angle de diffusion dans le référentiel du laboratoire (LAB). De manière générale, la section efficace macroscopique de diffusion est la somme des sections efficaces microscopiques de tous les isotopes présents dans le matériel considéré :

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \leftarrow E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}) = \sum_{i=1}^{n} n_i \sum_j \nu_{i,j} \sigma_s^{i,j}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}) \ ,$$

avec

- i, type de noyau ;
- j, type de diffusion : élastique, inélastique, (n,xn) ;
- $\nu_{i,j}$, le nombre de neutrons obtenus après un choc sur i et une réaction j : x pour une réaction (n,xn), 1 sinon ;
- $\sigma_s^{i,j}$, section efficace de diffusion de type j pour un choc sur le noyau i.

La cinématique de la collision neutron/noyau est toujours analysée par commodité dans le système du centre de masse (CM). L'anisotropie intervenant alors dans le **référentiel du centre de masse** est due principalement au type de collision et aux propriétés physiques du noyau (masse, vitesse initiale). De manière générale, la diffusion élastique est isotrope pour des énergies inférieures à 100 KeV en moyenne. Au delà, la distribution angulaire devient de plus en plus marquée vers l'avant. Cet effet est de plus croissant avec la masse du noyau collisionné, et reste peu prononcé pour les isotopes légers tels que l'hydrogène. Ainsi, la distribution angulaire dans le cas d'un choc élastique peut être fortement anisotrope, typiquement à haute énergie et pour des isotopes lourds. A l'inverse, la diffusion inélastique peut être généralement considérée comme isotrope dans le CM.

Les calculs s'opérant dans le référentiel LAB, il convient de s'intéresser à l'effet du changement de repère sur la densité de probabilité du cosinus de diffusion. On considère uniquement le cas élastique. L'expression du cosinus de diffusion dans le référentiel LAB μ_L en fonction

du référentiel du CM μ_C s'écrit :

$$\mu_L = \frac{1 + A\mu_C}{\sqrt{A^2 + 2A\mu_C + 1}} \ , \tag{7.3}$$

donc :

$$\frac{d\mu_C}{d\mu_L} = \frac{(1 + 2A\mu_C + A^2)^{3/2}}{A^2(\mu_C + A)} \ . \tag{7.4}$$

Or on a :

$$\mathcal{P}_e(\mu_L)d\mu_L = \mathcal{P}_e(\mu_C)\left|\frac{d\mu_C}{d\mu_L}\right| d\mu_L \ , \tag{7.5}$$

Soit

$$\mathcal{P}_e(\mu_L) = \left|\frac{(1 + 2A\mu_C + A^2)^{3/2}}{A^2(\mu_C + A)}\right| \mathcal{P}_e(\mu_C) \ . \tag{7.6}$$

On observe alors deux tendances :

- Pour $A \to +\infty$: $\mu_L \simeq \mu_C$. Pour le cas de noyaux lourds, il n'y a pas d'impacts significatifs du changement de repère sur la distribution angulaire.
- Pour $A \to 1$:

$$\frac{(1 + 2A\mu_C + A^2)^{3/2}}{A^2(\mu_C + A)} \simeq 2\sqrt{2}\sqrt{1 + \mu_C} \ , \tag{7.7}$$

  Or

$$\sqrt{1 + \mu_C} \simeq \sqrt{2}\mu_L \ , \tag{7.8}$$

  D'où :

$$\mathcal{P}_e(\mu_L) = 4\mu_L\mathcal{P}_e(\mu_C) \ . \tag{7.9}$$

  On rappelle que la densité de probabilité du cosinus dans le référentiel CM s'écrit pour une diffusion isotrope $\mathcal{P}_e(\mu_C) = \frac{1}{2}$, avec $-1 \leq \mu_C \leq 1$. D'où

$$\mathcal{P}_e(\mu_L) = 2\mu_L, \qquad 0 \leq \mu_L \leq 1 \ . \tag{7.10}$$

  La distribution angulaire du système devient ainsi fortement piquée vers l'avant. On peut généraliser ces relations au cas inélastique en remplaçant A par

$$\gamma(E) = A\sqrt{1 + \frac{A+1}{A}\frac{Q}{E}}$$

  dans les relations 7.3, 7.4, 7.5, 7.6.

7.3 Modélisation de l'anisotropie en énergie continue

Les équations de la cinématique entraînent une corrélation entre le cosinus de diffusion μ et le couple (E, E'), ce qui peut conduire à deux approches possibles dans le traitement de la collision. On peut dans un premier temps échantillonner le cosinus de diffusion, typiquement dans le référentiel du centre de masse (CM), puis ensuite déterminer l'énergie secondaire et la direction dans le référentiel du laboratoire à partir des relations de la cinématique. C'est l'approche retenue dans les codes Monte Carlo à énergie continue, et ceci s'exprime formellement suivant

$$\sigma_s^{i,j}(E' \leftarrow E, \mu) = \sigma_s^{i,j}(E) f^{i,j}(E, \mu) P_\mu^{i,j}(E' \leftarrow E) \ , \tag{7.11}$$

Avec :

- $\sigma_s^{i,j}(E)$ la section efficace de diffusion de type j sur le noyau i.
- $f^{i,j}(E, \mu)$ densité de probabilité permettant d'échantillonner μ_C en fonction de E.
- $P_\mu^{i,j}(E' \leftarrow E)$ fonction permettant de calculer ensuite E'.

Les évaluations de données nucléaires (format ENDF) stockent ainsi les lois $f^{i,j}(E, \mu)$ pour chaque réaction en fonction de l'énergie incidente, sous la forme de série tronquée de Legendre :

$$f^{i,j}(E, \mu) = \sum_{\ell=1}^{L} \frac{2\ell + 1}{2} a_\ell(E) P_\ell(\mu) \ . \tag{7.12}$$

Les codes Monte Carlo ponctuels transforment ensuite ces lois en tables équiprobables pour le cosinus de diffusion, interpolées en fonction de l'énergie incidente. Ces plages équiprobables sont directement utilisables par les codes Monte Carlo à énergie continue. La direction dans le référentiel LAB ainsi que l'énergie secondaire E' sont ensuite calculées à partir des équations de la cinématique.

7.4 Modélisations de l'anisotropie dans le cas multigroupe

Dans les codes de transport basés sur l'approche multigroupe, la section de diffusion est définie suivant

$$\sigma_s(g) = \sigma_e(g) + \sigma_{in}(g) + \sum_{x \geq 2} \sigma_{n,xn}(g) \text{ avec } g = [E_g, E_{g+1}]. \tag{7.13}$$

Les matrices de transfert sont définies à différents ordres de Legendre par :

$$\sigma_{s,\ell}(g' \leftarrow g) = \sigma_{e,\ell}(g' \leftarrow g) + \sigma_{in,\ell}(g' \leftarrow g) + \sum_{x \geq 2} \sigma_{n,xn,\ell}(g' \leftarrow g) \ . \tag{7.14}$$

En sortie du module GROUPR de NJOY, on dispose ainsi pour $0 \leq \ell \leq L+1$ des moments de Legendre des coefficients de la matrice de transfert $\sigma_{s,\ell}(g' \leftarrow g)$ et donc des moments de la section efficace totale $\sigma_{s,\ell}(g) = \sum_{g'} \sigma_{s,\ell}(g' \leftarrow g)$. La difficulté apparaissant ici est l'absence d'informations particulières à chaque type de réaction. On peut néanmoins reformuler la section efficace de transfert $g' \leftarrow g$ pour le cosinus de diffusion μ suivant :

$$\sigma_s^{g' \leftarrow g}(\mu) = \sigma_{s,0}(g) p_{g' \leftarrow g} f_{g' \leftarrow g}(\mu) \ , \tag{7.15}$$

avec

- $p_{g' \leftarrow g}$ fonction permettant d'échantillonner g' directement en fonction de g,
- $f_{g' \leftarrow g}(\mu)$ densité de probabilité pour μ pour le couple (g, g').

En effet, la probabilité d'un transfert $g' \leftarrow g$ et la densité de probabilité du cosinus μ peuvent s'écrire en fonction des données initiales :

- $p_{g' \leftarrow g} = \dfrac{\sigma_{s,0}^{g' \leftarrow g}}{\sigma_{s,0}^{g}}$.
- $f_{g' \leftarrow g}(\mu) = \sum_{\ell=0}^{L} \dfrac{2\ell+1}{2} f_{\ell, g' \leftarrow g} P_\ell(\mu)$, avec $f_{\ell, g' \leftarrow g} = \dfrac{\sigma_{s,\ell}^{g' \leftarrow g}}{\sigma_{s,0}^{g' \leftarrow g}}$.

L'approche retenue dans tous les codes Monte Carlo reposant sur l'approximation multigroupe implique d'abord de déterminer l'énergie secondaire en fonction du type de réaction et de l'énergie initiale, puis ensuite évaluer μ à partir de la densité de probabilité associée au transfert $g \leftarrow g'$. Ceci s'exprime suivant :

1. L'énergie secondaire est déterminée suivant $p_{g' \leftarrow g}$.
2. Le cosinus de diffusion (dans le référentiel LAB) est tirée suivant $f_{g' \leftarrow g}(\mu)$.

L'approche multigroupe et sous-groupe conduisent à des approches très similaires. En effet dans le cas de la méthode des sous-groupes développée dans cette étude, les coefficients de la matrice de transfert sont disponibles sous la forme d'une série de Legendre pour chaque transfert d'un sous-groupe k d'un groupe g vers un groupe g', que l'on note $g' \leftarrow \{g, k\}$.

$$\sigma_s^{g' \leftarrow \{g,k\}}(\mu) = \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{2} \sigma_{s,\ell}^{g' \leftarrow \{g,k\}} P_\ell(\mu) \ , \tag{7.16}$$

Comme dans le cas multigroupe présentée à l'Eq. 7.15, on peut écrire :

$$\sigma_s^{g'\leftarrow\{g,k\}} = \sigma_{s,0}^{g,k} p_{g'\leftarrow\{g,k\}} f_{g'\leftarrow\{g,k\}}(\mu) \ , \tag{7.17}$$

où

- $p_{g'\leftarrow\{g,k\}} = \dfrac{\sigma_{s,0}^{g'\leftarrow\{g,k\}}}{\sigma_{s,0}^{g,k}}$, probabilité d'un transfert $g' \leftarrow \{g,k\}$.
- $f_{g'\leftarrow\{g,k\}}(\mu) = \displaystyle\sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{2} f_{\ell,g'\leftarrow\{g,k\}} P_\ell(\mu)$, avec $f_{\ell,g'\leftarrow\{g,k\}} = \dfrac{\sigma_{s,\ell}^{g'\leftarrow\{g,k\}}}{\sigma_{s,0}^{g'\leftarrow\{g,k\}}}$, probabilité de densité pour le cosinus de diffusion μ correspondant au transfert $g' \leftarrow \{g,k\}$.

Cependant les relations précédentes indiquent que nous ne disposons pas explicitement des coefficients de transfert d'un sous-groupe vers un autre sous-groupe, mais uniquement d'un sous-groupe d'un groupe donné vers un autre groupe (qui peut être le même que celui d'origine). L'approche usuelle est donc de répartir les neutrons dans les sous-groupes $k' \in [1, K']$ du groupe secondaire g' suivant leur importance (Cullen, 1986) :

$$\sigma_s^{\{g',k'\}\leftarrow\{g,k\}} = \omega'_k \sigma_s^{g'\leftarrow\{g,k\}} \ . \tag{7.18}$$

La loi de diffusion multigroupe peut être écrite en fonction des coefficients de la matrice de transfert multibande :

$$\sigma_s^{g'\leftarrow g} = \sum_{k=1}^{K} \omega_k \sigma_s^{g'\leftarrow\{g,k\}} \ . \tag{7.19}$$

En particulier, il n'y a pas de transfert du sous-groupe k du groupe g vers le sous-groupe k' du groupe g' s'il n'y a pas de transfert multigroupe de g vers g'. Une réaction de diffusion sera ainsi traitée en trois étapes dans le cas de la méthode des sous-groupes :

1. Tirage du groupe secondaire g' à partir de la loi de probabilité $p_{g'\leftarrow\{g,k\}}$.
2. Tirage du cosinus μ à partir de $f_{g'\leftarrow\{g,k\}}(\mu)$.
3. Tirage du nouveau sous-groupe k' dans le groupe g'.

On rappelle que ces données sont initialement calculées pour des codes déterministes, et des limitations apparaissent lors du passage à un algorithme Monte Carlo. La première a déjà été mentionnée et est reliée à l'utilisation d'une série de polynômes de Legendre tronquée pour représenter la densité de probabilité. Par ailleurs, l'approximation multigroupe renforce la corrélation entre le couple $g' \leftarrow g$ (ou $g' \leftarrow \{k,g\}$) et le cosinus de diffusion μ.

Ainsi dans le cadre des méthodes déterministes, les méthodes numériques passant par une représentation du flux angulaire sous la forme d'harmoniques sphériques peuvent directement

utiliser les moments de Legendre pour la section efficace de diffusion. Dans le cadre d'un algorithme Monte Carlo, la sélection de la direction angulaire passe par l'échantillonnage de la densité de probabilité du cosinus de diffusion. Or la représentation en polynômes de Legendre, théoriquement adéquate, possède numériquement des limitations dues à l'utilisation d'une expansion d'ordre faible. Un cas classique est dans le cas linéairement anisotrope : la distribution angulaire devient partiellement négative dès que la valeur absolue du cosinus moyen de diffusion est supérieure à 1/3. Des problèmes semblables apparaissent également aux ordres élevés, de par l'oscillation importante des polynômes de Legendre. Ceci conduit à une densité de probabilité pouvant présenter des parties négatives ou en dehors du support $[\mu_{min}, \mu_{max}]$, telle qu'illustrée à la figure 7.1 dans le cas de $f_{1<-1}(\mu)$ pour ^1H de H_2O avec le maillage SHEM-295.

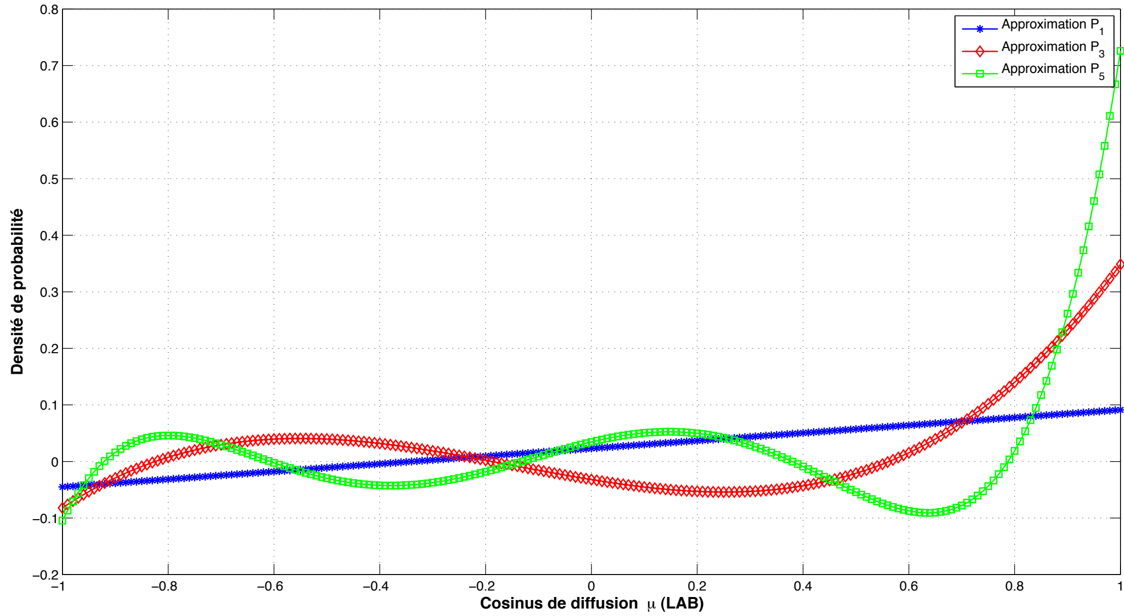


Figure 7.1 Densité de probabilité pour $f_{6\leftarrow 6}(\mu)$, isotope ^1H de H_2O, SHEM-295

Il est donc nécessaire de contourner le problème en évitant d'échantillonner directement dans la densité de probabilité définie par la série des moments de Legendre. La renormalisation de la densité de probabilité est connue pour ne pas être une solution adéquate (Brockmann, 1981).

Une autre limitation est une conséquence directe du découpage multigroupe. On rappelle

l'expression du cosinus de diffusion en fonction du couplet (E,E') dans le cas d'une diffusion élastique :

$$\mu = \mu_L = \frac{1-A}{2}\sqrt{\frac{E}{E'}} + \frac{1+A}{2}\sqrt{\frac{E'}{E}} = S(E,E') \ . \tag{7.20}$$

L'approche multigroupe implique de déterminer d'abord E' puis μ. Or d'après l'équation 7.20, on voit que (E,E') détermine entièrement μ. La loi de probabilité de μ se représente donc par une distribution de Dirac : $f_{E' \leftarrow E}(\mu) = \delta\left(\mu - S(E,E')\right)$. Dans le cas multigroupe, l'information sur l'énergie est perdue et la diffusion fait passer le neutron d'un groupe $g = [E_1, E_2]$ à un groupe $g' = [E'_1, E'_2]$, où g peut correspondre à g'. Les valeurs possibles pour le rapport E/E' déterminant μ sont donc restreintes à l'intervalle $\left[\frac{E'_1}{E_2}, \frac{E'_2}{E_1}\right]$.

La loi d'anisotropie $f_{g' \leftarrow g}(\mu)$ va ainsi être non nulle que sur une partie réduite de l'intervalle $[-1, 1]$, correspondant en pratique à $[S(E'_1, E_2), S(E'_2, E_1)]$. Par conséquent, plus la largeur des groupes sera réduite, plus l'intervalle possible pour μ sera réduit. La largeur de l'intervalle permis pour μ sera également fortement dépendante du type de noyau. Dans le cas de noyaux lourds, le gain maximal en léthargie par choc est faible, ce qui implique majoritairement des transferts limités à un groupe g vers g lui-même dans le cadre de maillage fin tel que retenu dans cette étude. Dans ce cas, toutes les valeurs sont permises pour E/E' et la densité de probabilité pour μ est répartie sur $[-1, 1]$ en entier.

A l'inverse, dans le cas de noyaux légers la largeur des groupes est inférieure au gain maximal en léthargie. Dans ce cas, les valeurs de μ sera fortement dépendante du transfert $g' \leftarrow g$.

7.5 Résumé des causes de l'anisotropie

L'anisotropie de la diffusion a comme cause trois phénomènes distincts :

1. L'anisotropie dans le référentiel CM, prépondérante lors des diffusions sur des noyaux lourds à haute énergie. La diffusion est piquée vers l'avant.
2. L'anisotropie due au passage du référentiel CM vers le référentiel LAB. Le cosinus de diffusion est augmenté dans LAB par rapport à CM. Ceci concerne principalement les noyaux légers.
3. L'anisotropie due à l'utilisation de données multigroupes dans un code Monte Carlo. Ceux-ci procèdent par :
   - L'échantillonnage du groupe d'arrivée d'après $\frac{\sigma_{s,0}^{g' \leftarrow g}}{\sigma_{s,0}^{g}}$.
   - Le cosinus de diffusion est ensuite échantillonnée à partir des lois d'anisotropies multigroupes disponibles pour $g' \leftarrow g$.

Dans ce dernier point, la corrélation entre $g' \leftarrow g$ et μ engendre une restriction des valeurs possibles pour l'angle de diffusion lorsque l'on raffine le maillage énergétique. Ceci est d'autant plus important que le noyau est léger. Par ailleurs, la distribution angulaire présentera des oscillations très fortes dues à l'utilisation d'un développement en polynômes de Legendre.

Tous ces facteurs viennent contribuer à rendre peu valide l'approximation de collision isotrope dans le référentiel LAB. Dans la suite de ce chapitre, nous présentons toutes les méthodes disponibles dans `MC:` afin de traiter l'anisotropie de la diffusion.

L'objectif est de pouvoir échantillonner μ lors de la marche aléatoire, à partir de la densité de probabilité $f_{g' \leftarrow g}(\mu)$. Toutes ces méthodes reposent sur la réécriture de la densité de probabilité du cosinus de diffusion par préservation des moments de Legendre associés. On cherche ainsi une densité de probabilité non négative conservant l'information disponible.

Ceci est à la base de différentes techniques utilisées dans les codes Monte Carlo multigroupes, notamment les méthodes de représentation par paliers (équiprobables ou non) de la série de Legendre ainsi que la méthode des angles discrets, retenue dans cette étude. La méthode des angles discrets passe par la réécriture de la densité de probabilité angulaire en une série de distributions de Dirac conservant les moments associées. On retombe ainsi sur un problème de moments et la méthode CALENDF peut être également appliquée.

7.6 Correction de transport

Cette technique est largement utilisée pour les méthodes déterministes basées sur la résolution de la forme intégrale de l'équation de transport, typiquement la méthode des probabilités de collision. Elle est par ailleurs facilement adaptable au cas Monte Carlo. L'idée de base est de considérer la diffusion isotrope, mais d'ajouter un pic de Dirac en +1 pour la densité de probabilité du cosinus de diffusion. Ceci s'exprime par :

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \leftarrow E, \mu) = \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{2} \overline{\Sigma}_{s,\ell}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) P_\ell(\mu) + \Delta\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E)\delta(\mu - 1) \ . \tag{7.21}$$

avec $\overline{\Sigma}_{s,\ell}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E)$ coefficient de Legendre modifié et $\Delta\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E)$ coefficient additionnel. Ces termes sont calculés par préservation des moments de Legendre de l'équation 7.21.

On a ainsi pour $0 \leq \ell \leq L+1$:

$$\int_{-1}^{1} d\mu \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \leftarrow E, \mu) P_\ell(\mu) = \Sigma_{s,\ell}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) \ , \tag{7.22}$$

Par combinaison des relations 7.21 et 7.22, on obtient

$$\overline{\Sigma}_{s,\ell}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) + \Delta\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) = \Sigma_{s,\ell}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) \text{ pour } 0 \leq \ell \leq L \ , \tag{7.23}$$

et

$$\Delta\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) = \Sigma_{s,L+1}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) \text{ pour } \ell = L+1 \ . \tag{7.24}$$

Les sections efficaces dites P_0-*corrigées transport* s'obtiennent en posant $L = 0$ dans les relations précédentes ($\Delta\Sigma_{tr} = \Sigma_{s,1}$), puis par substitution dans l'équation de transport. On définit ainsi la section efficace totale corrigée transport :

$$\overline{\Sigma}_t(\mathbf{r}, E) = \Sigma_t(\mathbf{r}, E) - \Sigma_{s,1}(\mathbf{r}, E) \ , \tag{7.25}$$

Et pour la matrice de diffusion :

$$\overline{\Sigma}_{s,0}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) = \Sigma_{s,0}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) - \delta(E' - E)\Sigma_{s,1}(\mathbf{r}, E' \leftarrow E) \ . \tag{7.26}$$

7.7 Méthode des angles discrets

La méthode des angles discrets repose sur la discrétisation de la densité de probabilité $f_{g' \leftarrow g}(\mu)$ en une somme de K distributions de Dirac :

$$f_{g' \leftarrow g}(\mu) \simeq \sum_{k=1}^{K} \omega_k \delta(\mu - \mu_k) \ . \tag{7.27}$$

Comme dans le cas des tables de probabilité pour une section efficace, la table de probabilité d'ordre K pour $f_{g' \leftarrow g}(\mu)$ doit conserver $2K$ moments associés. On retombe ainsi sur une quadrature de Gauss. Initialement, on dispose de $L+1$ moments de Legendre avec L toujours impair, ce qui conduit à $K = \frac{L+1}{2}$ valeurs discrètes pour μ. On a donc le système suivant, comportant $2K$ équations pour $2K$ inconnues :

$$\mathcal{M}_n = \sum_{k=1}^{K} \omega_k \mu_k^n \text{ avec } N_{min} \leq n \leq N_{max} \ . \tag{7.28}$$

Les valeurs retenues sont dans ce cas $N_{min} = 0$ et $N_{max} = L$. Par ailleurs, les moments (simples) $\mathcal{M}_n$ pour la densité de probabilité $f_{g' \leftarrow g}(\mu)$ sont définis tels que :

$$\mathcal{M}_n = \int_{-1}^{1} d\mu f_{g' \leftarrow g}(\mu) \mu^n \ . \tag{7.29}$$

Or il existe une relation directe entre les moments $\mathcal{M}_n$ et les moments de Legendre dont nous disposons initialement. On a en effet :

$$\mu = P_1(\mu) \tag{7.30}$$

$$\mu^2 = \frac{1}{3} \left[P_0(\mu) + 2P_2(\mu)\right] \tag{7.31}$$

$$\mu^3 = \frac{1}{5} \left[3P_1(\mu) + 2P_3(\mu)\right] \tag{7.32}$$

$$\mu^4 = \frac{1}{35} \left[7P_0(\mu) + 20P_2(\mu) + 8P_4(\mu)\right] \tag{7.33}$$

$$\mu^5 = \frac{1}{63} \left[27P_1(\mu) + 28P_3(\mu) + 8P_4(\mu)\right] \tag{7.34}$$

$$\mu^6 = \frac{1}{231} \left[33P_0(\mu) + 110P_2(\mu) + 72P_4(\mu) + 16P_6(\mu)\right] \tag{7.35}$$

Ce qui se généralise sous la forme (Weisstein, 2010) :

$$\mu^n = \sum_{\ell=n,n-2,\ldots} \frac{(2\ell+1)n!}{2^{(n-\ell)/2} \left(\frac{1}{2}(n-\ell)\right)!(\ell+n+1)!!} P_\ell(\mu) \ . \tag{7.36}$$

On a ainsi

$$\mathcal{M}_n = \int_{-1}^{1} d\mu f_{g' \leftarrow g}(\mu) \mu^n = \int_{-1}^{1} d\mu f_{g' \leftarrow g}(\mu) \sum_{\ell=n,n-2,\ldots} \frac{(2\ell+1)n!}{2^{(n-\ell)/2} \left(\frac{1}{2}(n-\ell)\right)!(\ell+n+1)!!} P_\ell(\mu) \tag{7.37}$$

Soit en fonction des moments de Legendre $f_{\ell,g' \leftarrow g} = \int_{-1}^{1} d\mu \ P_\ell(\mu) f_{g' \leftarrow g}(\mu)$:

$$\mathcal{M}_n = \sum_{\ell=n,n-2,\ldots} \frac{(2\ell+1)n!}{2^{(n-\ell)/2} \left(\frac{1}{2}(n-\ell)\right)!(\ell+n+1)!!} f_{\ell,g' \leftarrow g} \ . \tag{7.38}$$

Dans notre étude, l'ordre maximal de Legendre utilisé est $L = 5$, ce qui conduit à la définition des moments suivants :

$$\mathcal{M}_0 = 1 \tag{7.39}$$

$$\mathcal{M}_1 = f_{1,g'\leftarrow g} \tag{7.40}$$

$$\mathcal{M}_2 = \frac{1}{3}\left[f_{0,g'\leftarrow g} + 2f_{2,g'\leftarrow g}\right] \tag{7.41}$$

$$\mathcal{M}_3 = \frac{1}{5}\left[3f_{1,g'\leftarrow g} + 2f_{3,g'\leftarrow g}\right] \tag{7.42}$$

$$\mathcal{M}_4 = \frac{1}{35}\left[7f_{0,g'\leftarrow g} + 20f_{2,g'\leftarrow g} + 8f_{4,g'\leftarrow g}\right] \tag{7.43}$$

$$\mathcal{M}_5 = \frac{1}{63}\left[27f_{1,g'\leftarrow g} + 28f_{3,g'\leftarrow g} + 8f_{4,g'\leftarrow g}\right] \tag{7.44}$$

$$\mathcal{M}_6 = \frac{1}{231}\left[33f_{0,g'\leftarrow g} + 110f_{2,g'\leftarrow g} + 72f_{4,g'\leftarrow g} + 16f_{6,g'\leftarrow g}\right] \tag{7.45}$$

Une fois les moments calculés, l'approche CALENDF telle que présentée au chapitre 4 est utilisée avec les $L+1 = 2K$ moments cohérents. Ceci conduit au calcul d'une table de probabilité d'ordre $K = \frac{L+1}{2}$, pour chaque transfert $g' \leftarrow g$: $\{\omega_k, \mu_k\}_{k\in[1,K]}$.

Un exemple de table de probabilité est donné à la figure 7.2 pour l'isotope ^1H de H_2O. Le transfert considéré est du groupe 1 vers lui-même.

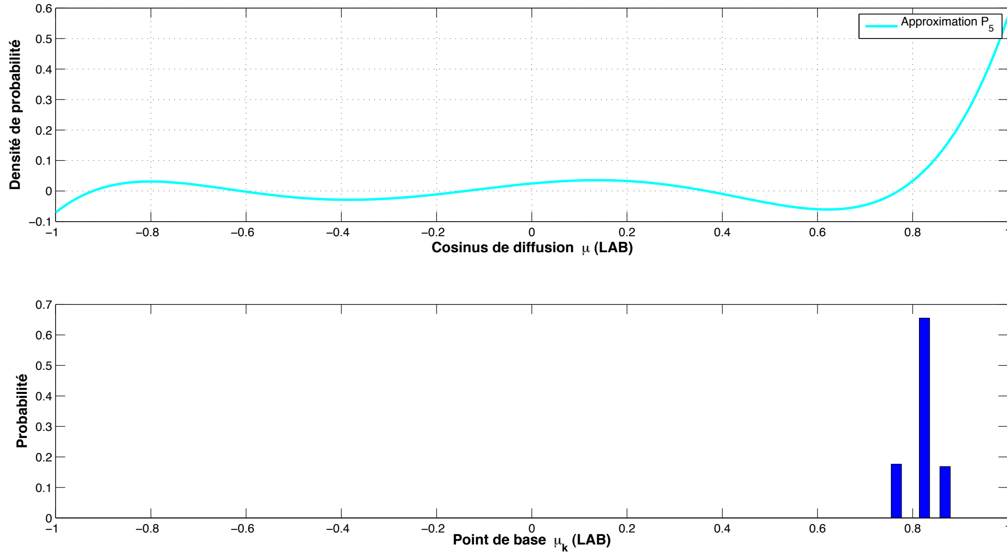


Figure 7.2 Table de probabilité pour $f_{1\leftarrow 1}(\mu)$, isotope ^1H de H_2O, SHEM–295

7.7.1 Test de cohérence des moments

La méthode CALENDF est extrêmement précise, particulièrement pour des tables de probabilité d'ordre K relativement faible, typiquement 3 pour $L = 5$. La précision de la méthode des angles discrets repose donc essentiellement sur la précision des moments de Legendre des coefficients de la matrice de transfert. Or ceux-ci peuvent présenter un certain nombre d'incohérences, dues aux différentes erreurs se propageant dans GROUPR lors de l'intégration numérique des coefficients de Legendre.

Par conséquent, les moments simples peuvent être eux aussi incohérents. Pour éviter d'introduire de nouvelles sources d'erreurs dans les calculs en utilisant des tables de probabilité fausses, une stratégie de test de cohérence des moments à été introduit dans le code MORET. Nous avons repris exactement la même approche, en l'étendant aux cas où la matrice de transfert est disponible par isotope et par sous-groupe.

On rappelle la définition des moments simples de la densité de probabilité, notée $f_{g' \leftarrow g}(\mu) = f(\mu)$ pour simplifier les notations :

$$\mathcal{M}_n = \int_{-1}^{1} d\mu \mu^n f(\mu) = E\left((f(\mu))^n\right) \tag{7.46}$$

Les moments centrés interviennent également. Ceux-ci sont définis formellement suivant :

$$\mathcal{U}_n = E\left((f(\mu) - E(f(\mu))^n\right) \tag{7.47}$$

Les moments centrés sont liés aux moments simples. Ainsi, on a pour les premiers ordres :

$$\mathcal{U}_2 = \mathcal{M}_2 - \mathcal{M}_1^2 \tag{7.48}$$

$$\mathcal{U}_3 = \mathcal{M}_3 - 3\mathcal{M}_1\mathcal{M}_2 + 2\mathcal{M}_1^3 \tag{7.49}$$

$$\mathcal{U}_4 = \mathcal{M}_4 - 4\mathcal{M}_1\mathcal{M}_3 + 6\mathcal{M}_1^2\mathcal{M}_2 - 3\mathcal{M}_1^4 \tag{7.50}$$

Les moments rapportés aux abscisses -1 et +1 interviennent également :

$$\mathcal{V}_n = \int_{-1}^{1} d\mu \mu^n (f(\mu) - 1) \tag{7.51}$$

$$\mathcal{W}_n = \int_{-1}^{1} d\mu \mu^n (f(\mu) + 1) \tag{7.52}$$

Les conditions imposées sur les moments $\mathcal{M}_n$ sont issues du problème du moment d'Hausdroff dont la théorie est présentée dans (Akhiezer, 1965). L'approche retenue dans MORET et dans `MC:` est de vérifier les conditions suivantes $\forall n \in [0,: L+1]$:

1. Les moments d'ordre pair $2n$ doivent être strictement positifs : $\mathcal{M}_{2n} > 0$.
2. Les moments d'ordre $2n$ doivent être inférieurs aux moments d'ordre $2n-2$: $\mathcal{M}_{2n} < \mathcal{M}_{2n-2}$.
3. Les moments centrés d'ordre pair $2n$ doivent être strictement positifs : $\mathcal{U}_{2n} > 0$.
4. Les moments centrés d'ordre $2n$ doivent être inférieurs aux moments centrés d'ordre $2n-2$: $\mathcal{U}_{2n} < \mathcal{U}_{2n-2}$.
5. Les moments rapportés à l'abscisse $+1$ d'ordre $2n$ pair doivent être strictement positifs : $\mathcal{V}_{2n} > 0$.
6. Les moments d'ordre $2n+1$ impair doivent être inférieurs en valeur absolue au moment d'ordre $2n$ pair : $|\mathcal{M}_{2n+1}| < \mathcal{M}_{2n}$.
7. Les moments rapportés à l'abscisse $+1$ d'ordre n impair doivent être strictement négatifs : $\mathcal{V}_{2n+1} < 0$.
8. Les moments rapportés à l'absisses -1 doivent être strictement positifs : $\mathcal{W}_n > 0$.
9. Les déterminants suivants doivent être positifs :

$$\begin{vmatrix} \mathcal{M}_{n-1} - \mathcal{M}_n & \mathcal{M}_{n-1} - \mathcal{M}_{n-2} \\ \mathcal{M}_{n-1} - \mathcal{M}_{n-2} & \mathcal{M}_{n-3} - \mathcal{M}_{n-2} \end{vmatrix} > 0 \ , \tag{7.53}$$

et

$$\begin{vmatrix} \mathcal{M}_{n-1} + \mathcal{M}_n & \mathcal{M}_{n-1} + \mathcal{M}_{n-2} \\ \mathcal{M}_{n-1} + \mathcal{M}_{n-2} & \mathcal{M}_{n-3} + \mathcal{M}_{n-2} \end{vmatrix} > 0 \ . \tag{7.54}$$

Dans le cas où une de ces conditions n'est pas respectée, l'ordre n est diminué de 2, jusqu'à réussite des tests.

7.8 Méthodes semi-continues

Ces méthodes sont utiles quand uniquement un petit nombre de moments est disponible, c'est-à-dire dans le cas d'un développement P_1 ou P_3 des matrices de transferts. Dans le cas de MORET ou de `MC:`, ces méthodes sont utilisées lorsque les moments d'ordres élevés sont incohérents.

En effet, la méthode des angles discrets pour des ordres faibles (une ou deux directions pour

un développement P_1 et P_3, respectivement) est susceptible d'engendrer des effets de raies. L'idée générale des méthodes semi-continues est de remédier à ce phénomène en rajoutant une partie continue aux distributions de Dirac issues de la méthode des angles discrets.

7.8.1 Principe général

On considère L correspondant à l'ordre disponible des moments, toujours impair et on pose $M = \frac{L-1}{2}$. On cherche une fonction $f^*(\mu)$ semi-continue conservant les $2M$ premiers moments de la distribution, ainsi qu'une fonction $\widetilde{f}$ de $M+1$ angles discrets et un réel $\beta \in [-1,1]$ tels que la fonction $\beta f^*(\mu) + (1-\beta)\widetilde{f}$ conserve $L+1$ moments de $f(\mu)$. Ceci peut s'exprimer par :

$$f(\mu) \equiv \beta f^*(\mu) + (1-\beta)\widetilde{f}(\mu) \ . \tag{7.55}$$

On note par la suite μ_i, μ_i^* et $\widetilde{\mu}_i$ les moments des distributions f, f^* et $\widetilde{f}$, respectivement. Les $2M+2$ moments de la fonction $\widetilde{f}$ sont ainsi :

$$\widetilde{\mu}_i = \begin{cases} \mu_i, & \text{pour } i = 0, ..., 2M-1 \\ \dfrac{\mu_i - \beta\mu_i^*}{1-\beta}, & \text{pour } i = 2M, 2M+1 \end{cases} \tag{7.56}$$

Les moments d'ordres $2M$ et $2M+1$ dépendent donc de β qui doit être déterminé de telle sorte que $\widetilde{f}$ soit définie positive. Il est par ailleurs important de conserver β aussi grand que possible, afin d'échantillonner principalement suivant la composante semi-continue f^*. Dans les sections suivantes, on décrit les méthodes de Coveyou et de Lux, permettant de conserver respectivement un développement à l'ordre P_1 et P_3 des sections efficaces de transfert.

7.8.2 Méthode de Coveyou

La technique de Coveyou est exposée dans l'ouvrage (Lux et Koblinger, 1990) afin de tenir compte d'une loi d'anisotropie linéaire dans le cadre d'un algorithme Monte Carlo. Elle repose sur l'utilisation combinée d'une densité de probabilité linéaire et d'une fonction de Dirac en +1 ou -1, dépendamment du signe du cosinus moyen $\bar{\mu}$. En pratique, on cherche un réel β, une fonction linéaire f^* et une distribution de Dirac $\widetilde{f}$ tels que :

$$f(\mu) = \beta f^*(\mu) + (1-\beta)\widetilde{f}(\mu) \ . \tag{7.57}$$

Le développement en polynômes de Legendre d'ordre 1 d'une fonction de valeur moyenne μ_1^* s'écrit :

$$f^*(\mu) = (1 + 3\mu_1^*\mu)/2 \ . \tag{7.58}$$

Cette fonction est positive si $|\mu_1^*| < \frac{1}{3}$. La méthode des angles discrets donne pour un cosinus moyen de $\widetilde{\mu}_1$

$$\widetilde{f}(\mu) = \delta(\mu - \widetilde{\mu}_1) \ . \tag{7.59}$$

En remplaçant les relations 7.58 et 7.59 dans l'équation 7.57, on obtient les expressions pour $\widetilde{\mu}_1$ et β :

$$\widetilde{\mu}_1 = \frac{\mu_1 - \beta\mu_1^*}{1-\beta} \ , \tag{7.60}$$

et

$$\beta = \frac{\widetilde{\mu}_1 - \mu_1}{\widetilde{\mu}_1 - \mu_1^*} \ . \tag{7.61}$$

On a par ailleurs les conditions suivantes :

$$\begin{cases} 0 \leq \beta \leq 1 \\ -1 \leq \widetilde{\mu}_1 \leq +1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \mu_1 \geq \mu_1^* \\ \beta \leq \min(1, \dfrac{1-\mu_1}{1-\mu_1^*}) \ . \end{cases} \tag{7.62}$$

On a également le critère de positivité pour f^* : $|\mu_1^*| < \frac{1}{3}$. On déduit des inégalités précédentes la valeur de β maximale, correspondant à $\widetilde{\mu}_1 = \pm 1$.

$$\mu_1^* = \mu_1, \quad \text{et} \quad \beta = 1 \quad \text{si} \quad |\mu_1| < \frac{1}{3} \ , \tag{7.63}$$

et

$$\mu_1^* = \frac{1}{3} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{3}{2}(1 - |\mu_1|) \quad \text{si} \quad |\mu_1| > \frac{1}{3} \ . \tag{7.64}$$

On obtient finalement la formulation suivante pour la fonction semi-continue :

$$f^*(\mu) = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 + 3\mu_1\mu) \quad \text{si} \quad 3|\mu_1| \leq 1 \\ \dfrac{1}{2}\left[\dfrac{1}{2}(1 - |\mu_1|)(1 + |\mu|) + (3|\mu_1| - 1)\delta(\mu - \dfrac{|\mu_1|}{\mu_1})\right] \quad \text{sinon} \ . \end{cases} \tag{7.65}$$

On obtient ainsi une densité de probabilité pour le cosinus de diffusion composée d'une partie linéaire et d'une distribution de Dirac en ± 1.

7.8.3 Méthode de Lux

La méthode de Lux permet d'obtenir une approximation conservant la loi d'anisotropie jusqu'à l'ordre P_3 (Lux, 1982). La fonction semi-continue est la même que dans le cadre de la méthode de Coveyou, corrigée par deux distributions de Dirac. La technique de Lux implique donc de déterminer 2 angles discrets et leurs poids associés $\{\omega_1, \mu_1\}$ et $\{\omega_2, \mu_2\}$. Les détails mathématiques, assez lourds, sont disponibles dans le papier (Lux, 1982). En

pratique, un appel à la technique de Lux retourne la probabilité p d'échantillonner suivant la loi linéairement anisotrope, elle-même comportant un Dirac en $\pm$ 1, et par conséquent la probabilité $1 - p$ d'échantillonner dans les deux distributions de Dirac.

7.8.4 Résumé de la méthodologie implantée dans `MC:`

Il est possible de spécifier un traitement par la méthode de Coveyou (P_1) ou de Lux (P_3) des réactions de diffusion. Cependant, dans le cas général où les sections efficaces sont disponibles à l'ordre P_n, la stratégie suivante est mise en place pour chaque transfert.

On teste dans un premier temps l'applicabilité de la méthode CALENDF à partir des moments disponibles. Si le test réussit, la méthode des angles discrets est utilisée avec $\frac{n+1}{2}$ angles. Si le test échoue, l'ordre n est réduit de 2, jusqu'à réussite du test. Si n devient plus petit que 4, alors la méthode de Lux est appliquée. En pratique, on aura trois types de traitement dans le cas général :

- Méthode de Coveyou (P_1).
- Méthode de Lux (P_3).
- Méthode des angles discrets ($P_{n\geq 5}$).

Usuellement, la majorité des transferts importants est traitée par la méthode des angles discrets, les autres transferts se répartiront suivant les méthodes de Coveyou et de Lux.

7.9 Validation : benchmarks de criticité

7.9.1 Méthodologie de validation

Afin de tester les différentes techniques de modélisation de l'anisotropie introduites dans `MC:`, différents benchmarks ont été retenus. Ces cas tests sont issus de problèmes de criticité et sont des configurations pour lesquelles l'anisotropie de la diffusion ne peut être négligée. Les résultats présentés dans cette section sont issus des études (Martin *et al.*, 2011a,b).

Typiquement, l'anisotropie influence des paramètres neutroniques tels que l'aire de migration et l'albédo :

- La modification de l'aire de migration entraîne une modification du taux de fuite des neutrons du milieu fissile. Cet effet se retrouve renforcé lorsque la géométrie elle-même favorise les fuites suivant une direction privilégiée.
- L'existence de directions de diffusion privilégiées peut modifier le nombre de neutrons se dirigeant vers le réflecteur, et par conséquent, le nombre de neutrons en revenant et se redirigeant vers la zone fissile. L'anisotropie influence donc la probabilité de reflexion

des neutrons. Cet effet se retrouve renforcé lorsque la dimension de la zone fissile est faible comparé au réflecteur.

Les configurations retenues par la suite afin de tester les différentes techniques de traitement de l'anisotropie présentent généralement un taux de fuite très important. On s'intéresse dans cette section à l'influence du traitement de l'anisotropie sur le k_{eff}. Les résultats obtenus par le module `MC:` seront comparés à ceux obtenus par la méthode S_N implantée au sein du module `SNT:`, ainsi qu'à ceux obtenus par le code MORET dans sa version multigroupe.

La librairie d'entrée au format Draglib comprend 295 groupes et est basée sur l'évaluation JEFF3.1, avec toutes les sections efficaces de transfert développées jusqu'à l'ordre P_7.

Options pour `SNT:`

La méthode S_N programmée au sein du module `SNT:` utilise une représentation du terme source sous la forme d'une série d'harmoniques sphériques et peut tenir compte de l'anisotropie de la diffusion jusqu'à l'ordre P_n.

Par conséquent, les méthodes S_N et Monte Carlo du code DRAGON utiliseront exactement les mêmes données, permettant ainsi une analyse détaillée des résultats. Les benchmarks retenus sont des configurations simples (1D plan ou 1D sphérique), pour lesquels les paramètres de discrétisation retenus sont les suivant :

- une discrétisation spatiale régulière conduisant à une maille de dimension 0.1 cm.
- Une quadrature angulaire de Gauss-legendre à l'ordre S_{64}.

Les calculs S_N sont réalisés en deux étapes. La première sera un calcul d'autoprotection des sections efficaces résonnantes par un calcul de sous-groupes utilisant la méthode S_N avec les mêmes options que le calcul de flux principal. En particulier, les tables de probabilité nécessaires à cette étape seront les mêmes que celles utilisées dans le cas `MC:`.

Dans le cas des milieux rapides (sphère de métal hautement enrichi en matériaux fissiles), le spectre neutronique est très dur, et l'impact de l'auto-protection est relativement faible. Cette étape est néanmoins conservée par soucis de cohérence avec l'algorithme Monte Carlo utilisant les tables de probabilité.

Options pour le code MORET

Le code MORET dans sa voie de calcul multigroupe a été également utilisé afin de comparer les résultats produits par `MC:`. Dans ce cas, le calcul S_N est utilisé afin de générer

les sections efficaces macroscopiques. La structure à 295 groupes en énergie est conservée et les mélanges sont homogénéisés. L'algorithme Monte Carlo programmée dans `MC:` et le code MORET ont la même stratégie de traitement de l'anisotropie de la diffusion, la différence étant que les lois d'anisotropie sont par mélange dans MORET et par isotope dans MC :. On note par la suite les résultats obtenus "D4-M4" (couplage DRAGON4-MORET4).

7.9.2 Expériences issues de l'ICSBEP

Les deux séries de deux benchmarks analysées ici sont issus d'expériences de criticité rapportée dans le manuel ICSBEP (OECD/NEA, 2002). Il s'agit de sphère de matériel fissile pur (uranium ou plutonim), avec ou sans réflecteur :

- HEU-MET-FAST-001 : l'assemblage critique Govida, correspondant à une sphère d'uranium hautement enrichi non réfléchie.
- PU-MET-FAST-001 : l'assemblage critique Jezebel, correspondant à une sphère de plutonium non réfléchie.
- PU-MET-FAST-005 : une sphère de plutonium réfléchie par du tungstène.
- HEU-MET-FAST-004 : une sphère d'uranium fortement enrichi réfléchie par de l'eau.

Ces configurations présentent un flux majoritairement rapide, où l'anisotropie est importante et ne peut être négligée. On analyse l'impact du traitement de l'anisotropie de la diffusion sur le k_{eff} dépendamment de l'ordre de Legendre disponible.

Tableau 7.1 HEU-MET-FAST-001 et PU-MET-FAST-001

HEU-MET-FAST-001 :					$k_{\text{eff}} = 1.000 \pm 100$ pcm	
ordre L	k_{eff} S_N	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$	k_{eff} `MC:`	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$	k_{eff} D4-M4	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$
P_0	1.1024	10240	1.1065 ± 66 pcm	10650	1.1023 ± 57 pcm	10230
P_1	0.9904	960	0.9971 ± 67 pcm	290	0.9953 ± 51 pcm	470
P_3	0.9952	480	0.9974 ± 63 pcm	260	0.9957 ± 52 pcm	430
P_5	0.9952	480	0.9964 ± 69 pcm	360	0.9964 ± 52 pcm	360
P_7	0.9952	480	0.9962 ± 69 pcm	380	0.9958 ± 50 pcm	420
PU-MET-FAST-001 :					$k_{\text{eff}} = 1.000 \pm 200$ pcm	
ordre L	k_{eff} S_N	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$	k_{eff} `MC:`	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$	k_{eff} D4-M4	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$
P_0	1.0989	9890	1.0998 ± 74 pcm	9980	1.1001 ± 52 pcm	10010
P_1	0.9911	890	0.9985 ± 72 pcm	150	0.9986 ± 48 pcm	140
P_3	0.9977	230	0.9967 ± 79 pcm	330	0.9978 ± 51 pcm	220
P_5	0.9977	230	0.9972 ± 74 pcm	280	0.9976 ± 47 pcm	240
P_7	0.9977	230	0.9984 ± 72 pcm	160	0.9968 ± 51 pcm	320

Les résultats sont présentés aux tableaux 7.1 et 7.2. De manière générale, les résultats `MC:` sont en excellent accord avec les résultats expérimentaux d'une part, et avec les résultats S_N

Tableau 7.2 PU-MET-FAST-005 et HEU-MET-FAST-004

PU-MET-FAST-005 :				$k_{\text{eff}} = 1.000 \pm 130$ pcm		
ordre L	k_{eff} S_N	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$	k_{eff} MC:	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$	k_{eff} D4-M4	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$
P_0	1.1529	15290	1.1545 ± 74 pcm	15450	1.1571 ± 73 pcm	15710
P_1	0.9761	2390	0.9962 ± 73 pcm	380	0.9976 ± 73 pcm	240
P_3	1.0022	220	1.0036 ± 73 pcm	360	1.0038 ± 73 pcm	380
P_5	0.0031	310	1.0038 ± 69 pcm	380	1.0026 ± 73 pcm	260
P_7	1.0031	310	0.9988 ± 68 pcm	120	1.0028 ± 73 pcm	280
HEU-MET-FAST-004 :				$k_{\text{eff}} = 0.9985 \pm 0$ pcm		
ordre L	k_{eff} S_N	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$	k_{eff} MC:	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$	k_{eff} D4-M4	$\lvert\Delta k_{\text{eff}}\rvert$
P_0	1.2030	20450	1.2040 ± 59 pcm	20550	1.2035 ± 62 pcm	20500
P_1	0.9826	1590	1.0102 ± 58 pcm	1170	0.9992 ± 60 pcm	70
P_3	1.0010	250	0.9957 ± 58 pcm	280	0.9964 ± 54 pcm	210
P_5	1.0012	270	1.0028 ± 58 pcm	430	0.9959 ± 61 pcm	260
P_7	1.0013	280	1.0023 ± 58 pcm	380	0.9955 ± 57 pcm	300

et MORET4 d'autre part.

On remarque que la marge d'erreur due à l'approximation isotrope est très importante, la présence d'un réflecteur venant encore accroître les disparités. Cependant, l'erreur décroit très rapidement, et dans la quasi majorité des cas, la méthode de Coveyou conduit à des résultats acceptables. Cette remarque a déjà été faite dans (Le Cocq, 1998), et renforce le fait qu'à information égale (sections efficaces de diffusion P_1), la méthode de Monte Carlo avec la méthode de Coveyou permet de meilleurs résultats que la méthode S_N. En effet, les k_{eff} obtenus via la méthode S_N avec des sections efficaces de transfert P_1 possèdent une erreur relative importante. Il est ainsi préférable d'utiliser une approximation P_3.

7.9.3 Assemblage REP MOX

Afin de confronter l'approche implémentée dans MC: sur des configurations de réacteur, un benchmark REP issu de la base de validation du code SERPENT a été analysé. Ce cas-test comprend 17×17 crayons avec trois types de combustibles MOX, enrichis à 2.9%, 4.4% et 5.6% en Pu fissile, et placés respectivement de l'exterieur vers le centre de l'assemblage. La disposition des crayons est illustrée à la figure 7.3.
Des conditions de réflexion périodique sont appliquées dans ce cas. On compare le flux intégré, homogénéisé et condensé à deux groupes, un rapide et un thermique (limite imposée à 0.625 eV). Le code SERPENT est utilisé afin de fournir des solutions de référence. On remarque premièrement que les facteurs de multiplication effectifs k_{eff} sont très similaires ;

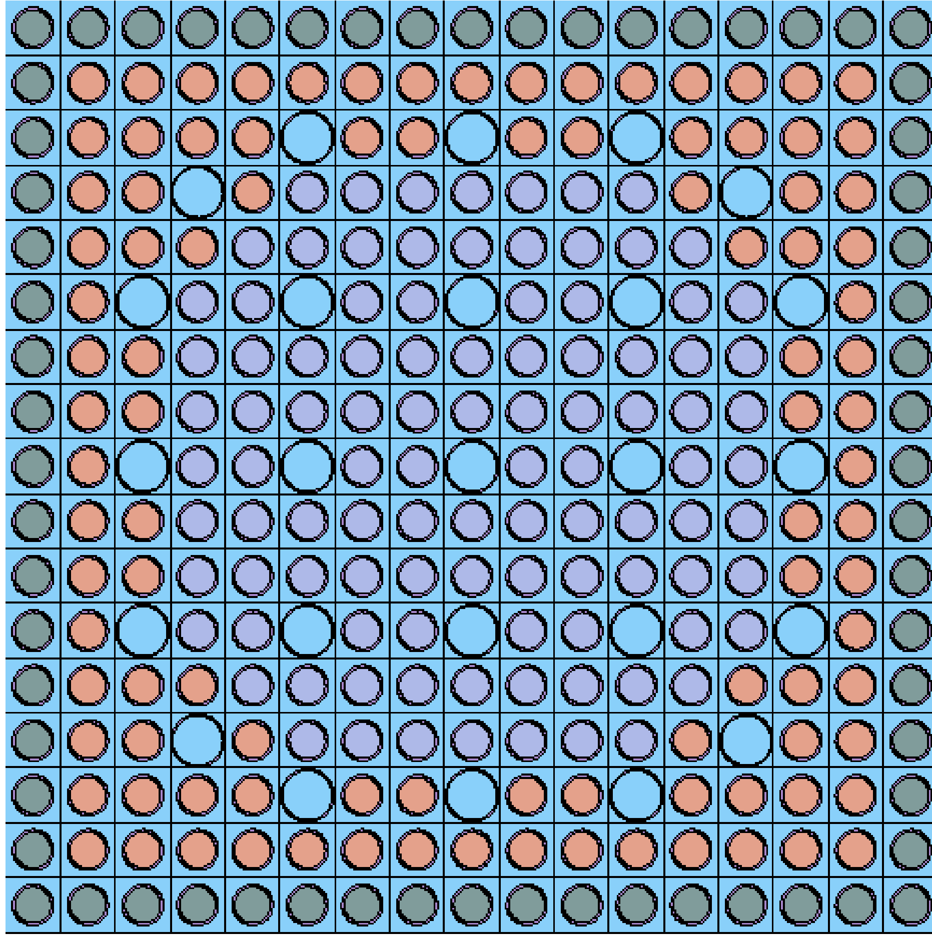


Figure 7.3 Assemblage MOX REP

- SERPENT : $k_{\text{eff}} = 1.16477 \pm 0.00034$.
- `MC:` avec sections efficaces de diffusion P_0 : $k_{\text{eff}} = 1.16557 \pm 0.00033$, soit une différence de 80 pcm pour les résultats ponctuels.
- `MC:` avec sections efficaces de diffusion P_5 : $k_{\text{eff}} = 1.16534 \pm 0.00033$, soit une différence absolue de 57 pcm.

On compare ensuite le flux homogénéisé par crayon obtenus via les deux codes, suivant la méthodologie introduite au chapitre 6. Les différences relatives sont reportées aux figures 7.4 and 7.5 dans les cas respectifs d'une expansion P_0 et P_5.

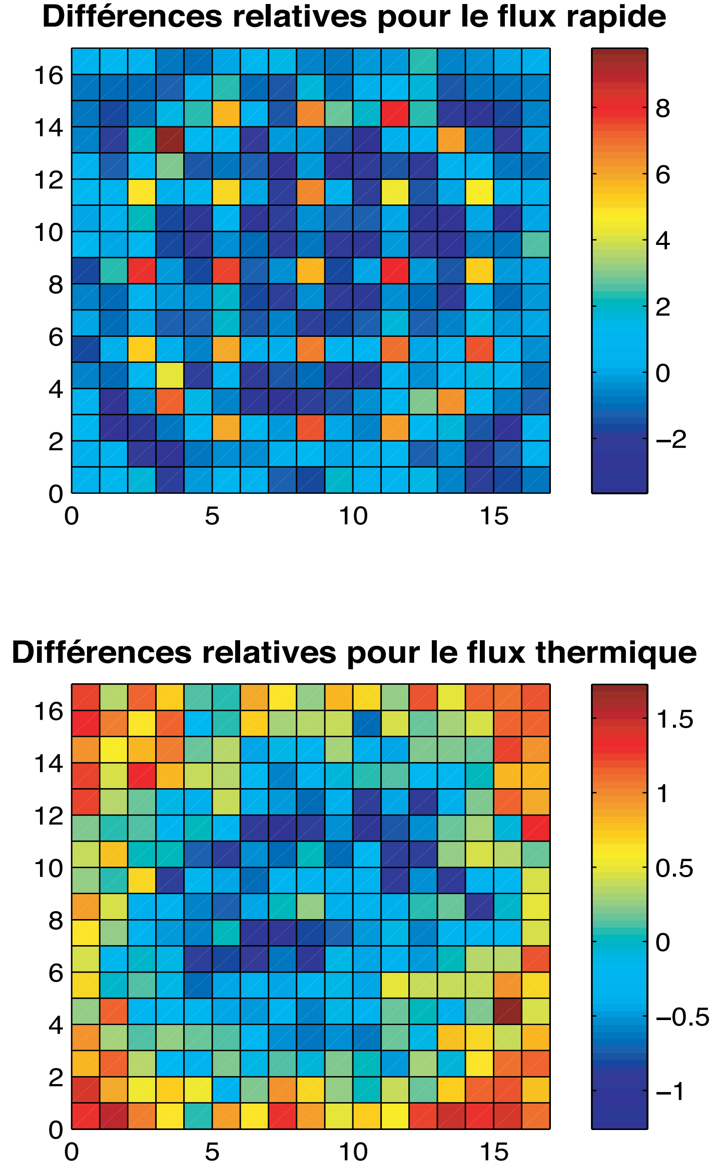


Figure 7.4 Écarts relatifs, sections efficaces P_0

On peut apercevoir que le cas P_0 conduit à des erreurs relativement importantes dans les trous d'eau dans le groupe rapide (jusqu'à 8%). L'introduction d'un développement P_5 avec la stratégie proposée permet d'éliminer les différences entre méthode sous-groupe et méthode à énergie continue. Au final, l'approche développée et validée à l'IRSN dans le cadre de sections efficaces multigroupes homogènes se généralise au cas isotopique avec sous-groupe.

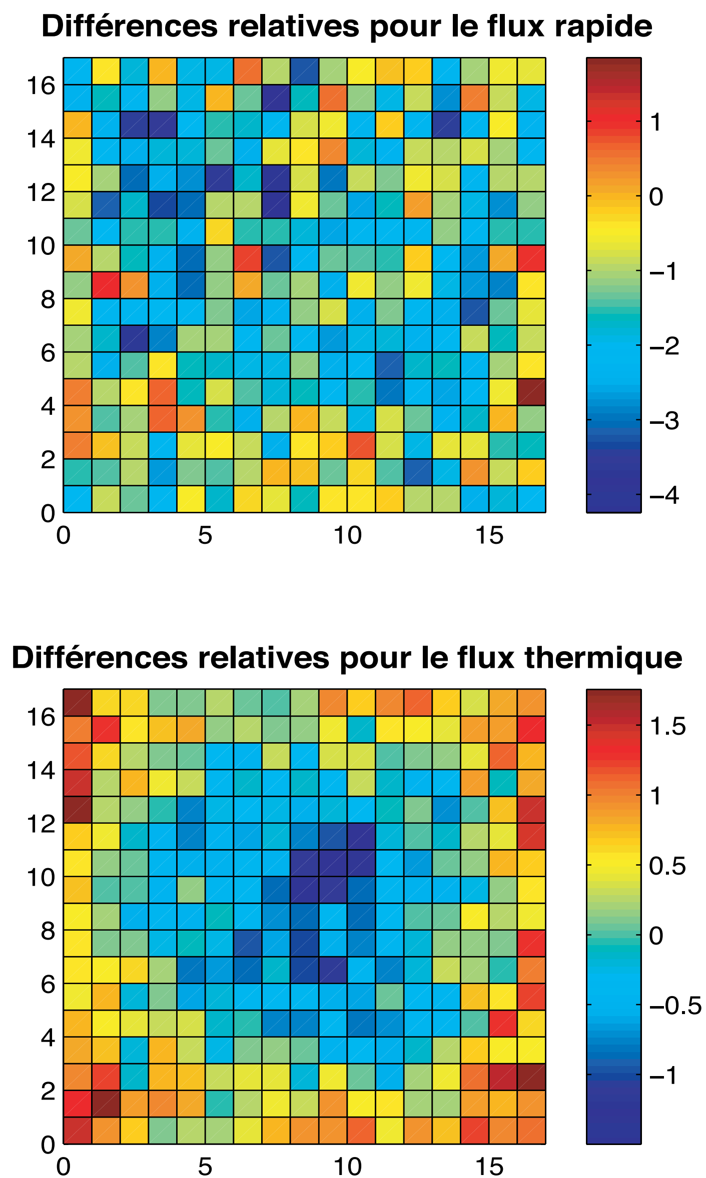


Figure 7.5 Écarts relatifs, sections efficaces P_5

Tableau 7.3 Répartition du temps de calcul dans `MC:`

Étape	Temps (seconde)	% temps total
Récupération de la librairie interne	3.27	0.13
Calcul des tables de probabilité pour μ	823.42	32.3
Échantillonnage des TP (sections efficaces)	567.88	22.3
Localisation du neutron	304.47	11.9
Analyse de la collision	247.21	9.7
Encaissement des taux de réactions	385.36	15.14
Échantillonage de μ (cosinus de diffusion)	202.93	7.96
Traitement des conditions aux frontières	9.92	0.39
Temps total	2544.49	100

On présente au tableau 7.3 les temps de calcul obtenus dans `MC:` sur un seul processeur (Intel Xeon ® cadencé à 2.67GHz). L'efficacité de la méthode de Delta-tracking, définie comme le nombre total de collisions réelles par rapport au nombre de collisions totales est dans ce cas de 58 %. En général, les valeurs obtenues dans les cas REP oscillent autour de 60%. Si l'on se focalise sur l'aspect transport, les étapes les plus coûteuses sont dans l'ordre le tirage des tables de probabilité pour les sections efficaces résonnantes, l'encaissement des taux de réactions et la localisation du neutron. Le temps requis pour scorer les données macroscopiques croît en fonction de la quantité demandée. Dans ce cas précis, il reste acceptable. Enfin, le temps de calcul total est ici d'environ 42 minutes, ce qui est tout à fait correct pour un code Monte Carlo étant donné le nombre important d'isotopes présents dans ce cas test.

La partie ≪ Calcul de tables de probabilité ≫ est l'étape la plus longue puisqu'il s'agit d'appliquer la méthode CALENDF pour chaque transfert pour chaque isotope. Il serait évidemment judicieux dans un code de production de calculer ces données en amont de la partie transport, et de les stocker pour un usage multiple.

Dans le cas d'un code Monte Carlo reposant sur la méthode des sous-groupes, il serait cependant pertinent d'inclure dans les librairies d'entrée les sections efficaces de diffusion élastique, inélastique ainsi que les données ponctuelles pour l'anisotropie. L'approche serait alors la même que dans les codes à énergie continue. Les tables de probabilité pour les sections efficaces seraient utilisées pour déterminer le libre parcours moyen, l'isotope collisionné, le type de réaction. En plus de l'indice de groupe, la valeur discrète de l'énergie serait stockée. Dans le cas d'une réaction de diffusion, l'information ponctuelle (en général, table de probabilité pour le cosinus de diffusion en fonction de l'énergie incidente qui est connue) avec les

lois de la cinématique permettent d'évaluer l'énergie secondaire (et donc le groupe d'arrivée). C'est par exemple l'approche des codes TART2005 et TRIPOLI4 quand utilisés en formalisme multibande.

Une autre possibilité, mentionnée dans (Ribon *et al.*, 2008), consisterait à générer les données multigroupes nécessaires à l'échantillonnage de la direction par un calcul Monte Carlo ponctuel préliminaire. Dans leur exemple, un seul atome (Beryllium 9) est soumis à un flux constant dans un groupe donné. Une collision élastique est simulée pour chaque neutron et le cosinus de diffusion échantillonné selon les lois ponctuelles est stocké par pallier (80 dans [-1,1] dans leur exemple) ainsi que l'énergie secondaire. Les données ainsi reconstituées (transferts groupe par groupe et probabilité de densité pour le cosinus de diffusion) peuvent être directement utilisables dans un code Monte Carlo multigroupe (et sous-groupe).

CHAPITRE 8

MODÈLE DE FUITE B_1 AVEC LA MÉTHODE MONTE CARLO

Dans ce chapitre, nous présentons l'adaptation d'un modèle de fuite basé sur l'approximation B_1 homogène dans le cadre d'un calcul de réseau réalisé par un algorithme Monte Carlo. Contrairement aux codes de réseau déterministes, la plupart des codes ou schémas de calcul reposant sur des codes Monte Carlo pour la génération de constantes par groupe n'utilisent pas de modèle de fuite. L'obtention du flux critique est pourtant primordial afin d'homogénéiser et de condenser adéquatement les sections efficaces et coefficients de diffusion qui seront utilisés dans le calcul de coeur, basé sur l'équation de la diffusion par exemple.

La première section présente le cadre mathématique du mode fondamental B_1 homogène. On décrit ensuite les tentatives d'adaptation d'un modèle de fuites réalisées ou en cours dans d'autres codes Monte Carlo de réseau, afin d'illustrer en quoi l'approche programmée dans `MC:` est différente. Les résultats obtenus via le code `MC:` sur des cellules et assemblages REP sont ensuites comparés à ceux obtenus par le schéma de calcul classique de DRAGON, architecturé autour de la méthode des P_{ij}. On présentera enfin quelque résultats comparatifs vis-à-vis de code SERPENT, qui dispose dans sa version 1.1.14 de novembre 2010 d'un modèle de fuite basé également sur l'approximation B_1 homogène, comme nous le décrirons.

8.1 Modèle de fuite pour l'homogénéisation de l'équation de transport neutronique

Comme cela a été décrit lors du chapitre 2, l'approche classique en physique des réacteurs consiste à diviser le schéma de calcul en plusieurs étapes. L'obtention des paramètres neutroniques tels que la répartition de puissance dans le coeur d'un réacteur nécessite la résolution de l'équation de transport neutronique :

$$(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma)\, \phi = S\phi + \frac{1}{k_{\text{eff}}} F\phi \ , \tag{8.1}$$

où

- $\phi = \phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$ le flux angulaire,

- S l'opérateur de diffusion :

$$S\phi = \int_{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \leftarrow \mathbf{\Omega}')\phi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') \ ,$$

- F l'opérateur de fission :

$$F\phi = \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \nu\Sigma_f(\mathbf{r}, E')\phi(\mathbf{r}, E') \ .$$

Il s'agit ici de trouver la plus grande valeur propre k_{eff} et le vecteur propre (strictement positif) associé ϕ. Comme mentionné dans le chapitre 1, l'importante hétérogénéité d'un coeur complet (plusieurs dizaine de milliers de crayons de combustibles pour un REP) et les capacités actuelles des ordinateurs ne permettent pas dans un temps raisonnable la résolution directe de cette équation avec les méthodes numériques usuelles. L'approche utilisée depuis plusieurs décennies consiste à *homogénéiser* l'équation de transport via *un calcul de réseau*, i.e. une cellule répétée périodiquement à l'infini, et d'utiliser un opérateur dégradé (typiquement diffusion) avec les données homogénéisées.

Cette technique est à la base de la méthodologie utilisée en physique des réacteurs, et la justification mathématique d'une telle hypothèse peut se trouver dans (Allaire et Bal, 1997), qui généralise la proposition faite dans (Larsen, 1975). Il y est démontré que dans le cas de la résolution de l'équation de transport dans le cadre d'une géométrie périodique infinie, le flux peut se représenter sous la forme d'un produit de deux termes (à un reste près) :

- le premier terme est le vecteur propre de l'équation de transport dans la cellule de périodicité.
- le deuxième terme est solution d'un problème aux valeurs propres pour une équation de diffusion dans le domaine homogénéisé.

Ceci s'exprime par :

$$\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \psi(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) + \phi_\epsilon(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) \ . \tag{8.2}$$

avec $\phi_\epsilon(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$ un reste qui est de l'ordre de la dimension de l'assemblage rapportée à celle du coeur complet. La relation 8.2 justifie mathématiquement l'approche usuelle des schémas de calculs. Le flux fin de l'équation 8.1 est factorisé par un terme $\varphi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$ dit *flux fondamental*, obtenu via la résolution de la même équation 8.1 avec des conditions de périodicité (milieu dit *infini*), avec un terme $\psi(\mathbf{r})$ solution de l'équation de diffusion sur le problème homogénéisé. Il est clair que plus le nombre d'assemblages identiques constituant le cœur est important, plus le flux obtenu dans un calcul de réseau approximera correctement le flux au niveau du réacteur.

Mais le calcul de réseau génère une autre approximation : la valeur propre obtenue au niveau de la cellule ou de l'assemblage ne sera pas égale à celle calculée sur le coeur hétérogène complet (typiquement 1 pour des conditions stationnaires), et par conséquent, le flux évalué peut être très différent du flux critique. Afin de corriger ceci, des modèles de fuite ont été proposés afin de modifier l'obtention de la valeur propre dans le calcul de réseau, de telle sorte à ce que celle-ci converge vers $k_{\text{eff}} = 1$. La totalité des modèles de fuite introduits jusqu'à maintenant dans les codes de réseau se basent sur la proposition précédente : le flux peut se séparer en une grandeur macroscopique $\psi(\mathbf{r})$ et un flux périodique $\varphi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$.

Encore ici, la démonstration mathématique de la référence (Allaire et Bal, 1997) conduisant à l'équation 8.2 justifie une telle hypothèse. L'introduction d'un modèle de fuite peut s'obtenir en recourant à la théorie asymptotique (Sanchez, 2009). En combinant l'équation 8.2 dans l'équation de référence 8.1, on obtient à l'ordre ϵ près :

$$\left(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla + \frac{\mathbf{\Omega} \cdot \nabla\psi}{\psi} + \Sigma\right)\varphi = S\varphi + \frac{1}{k_{\text{eff}}} F\varphi \ . \tag{8.3}$$

avec ici des conditions périodiques aux frontières. La fonction macroscopique $\psi(\mathbf{r})$ joue le rôle de paramètre critique que l'on va ajuster afin d'obtenir $k_{\text{eff}} = 1$.

L'introduction de l'équation 8.2 dans un réseau périodique implique que la distribution macroscopique en espace soit solution de l'équation de Laplace suivante :

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + B^2\psi(\mathbf{r}) = 0 \ , \tag{8.4}$$

où B^2, nommé buckling critique, est un nombre réel utilisé afin de modifier la courbure de $\psi(\mathbf{r})$ afin d'obtenir $k_{\text{eff}} = 1$. On peut donc écrire $\psi(\mathbf{r})$ sous forme exponentielle :

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 \exp(\mathbf{i}\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) \ , \tag{8.5}$$

avec $\mathbf{B}$ vecteur tel que $B^2 = \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$. Le flux neutronique s'écrit alors

$$\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \varphi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) \exp(\mathbf{i}\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) \ . \tag{8.6}$$

Il est important de remarquer que le flux fondamental $\varphi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega})$ est alors une grandeur complexe. En remplaçant l'Eq. 8.6 dans l'Eq. 8.1, on obtient

$$(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma + \mathbf{iB} \cdot \mathbf{\Omega})\, \varphi = S\varphi + \frac{1}{k_{\text{eff}}} F\varphi \ . \tag{8.7}$$

Résoudre l'équation 8.7 est très coûteux en terme de ressource informatique. En considérant que les effects hétérogènes sur le taux de fuite sont négligeables dans le cadre de réacteurs à spectre thermique, on remplace le flux fondamental par sa grandeur homogénéisée sur l'assemblage (Petrovic et Benoist, 1996). Ceci conduit à la factorisation suivante :

$$\phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = \varphi(E, \mathbf{\Omega}) \exp(i\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) \ . \tag{8.8}$$

En combinant l'équation 8.6 avec l'équation de transport 8.1 dans le cadre d'une géométrie infinie, homogène, on obtient :

$$\begin{aligned} [\Sigma(E) + i\mathbf{B} \cdot \mathbf{\Omega}]\, \varphi(E, \mathbf{\Omega}) = \int_{4\pi} d^2\Omega' \int_0^\infty & dE' \Sigma_s(E \leftarrow E', \mathbf{\Omega} \leftarrow \mathbf{\Omega}')\varphi(E', \mathbf{\Omega}') + \\ & \frac{\chi(E)}{4\pi k_{\text{eff}}} \int_0^\infty dE' \nu\sigma_f(E')\varphi(E') \end{aligned} \tag{8.9}$$

Le modèle B_1 homogène suppose un développement P_1 des sections efficaces de diffusion, ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} [\Sigma(E) + i\mathbf{B} \cdot \mathbf{\Omega}]\, \varphi(E, \mathbf{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \left\{ \Sigma_{s,0}(E \leftarrow E')\varphi(E') + \frac{3}{4\pi} \Sigma_{s,1}(E \leftarrow E')\mathcal{J}(E) \cdot \mathbf{\Omega} \right\} \\ + \frac{\chi(E)}{4\pi k_{\text{eff}}} \int_0^\infty dE' \nu\sigma_f(E')\varphi(E') \end{aligned} \tag{8.10}$$

où le courant fondamental est défini à l'aide du flux angulaire fondamental suivant

$$\mathcal{J}(E) = \int_{4\pi} d^2\Omega \mathbf{\Omega} \varphi(E, \mathbf{\Omega}) \tag{8.11}$$

L'équation 8.10 est ensuite intégrée suivant l'angle solide $\mathbf{\Omega}$, afin d'obtenir la première équation B_1 :

$$\Sigma(E)\varphi(E) + iB\mathcal{J}(E) = \int_0^\infty dE' \Sigma_{s,0}(E \leftarrow E')\varphi(E') + \frac{\chi(E)}{k_{\text{eff}}} \int_0^\infty dE' \nu\sigma_f(E')\varphi(E') \tag{8.12}$$

Afin d'obtenir la seconde équation du modèle B_1 homogène, l'équation 8.10 est multiplié par le facteur suivant

$$\omega(\mathbf{\Omega}) = \frac{1}{\Sigma(E) + i\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}}$$

et intégré sur $\mathbf{\Omega}$. Après simplification, on obtient

$$\begin{aligned}\varphi(E) = \alpha\left[B,\Sigma(E)\right]\left\{\int_0^\infty dE'\Sigma_{s,0}(E\leftarrow E')\varphi(E') + \frac{\chi(E)}{k_{\text{eff}}}\int_0^\infty dE'\nu\Sigma_f(E')\varphi(E')\right\} \\ -3i\beta\left[B,\Sigma(E)\right]B\int_0^\infty dE'\int_0^\infty \Sigma_{s,1}(E\leftarrow E')\mathcal{J}(E')\ .\end{aligned} \quad (8.13)$$

où les grandeurs suivantes ont été introduites :

$$\frac{1}{4\pi}\int_{4\pi} d^2\Omega \frac{\Sigma^2}{\Sigma^2 + (\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega})^2} = \alpha(B,\Sigma)\Sigma \quad (8.14)$$

et

$$\frac{1}{4\pi}\int_{4\pi} d^2\Omega \frac{(\mathbf{\Omega}\otimes\mathbf{\Omega})\cdot\mathbf{B}}{\Sigma^2 + (\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega})^2} = \beta(B,\Sigma)\mathbf{B} \quad (8.15)$$

Les fonctions $\alpha(B,\Sigma)$ et $\beta(B,\Sigma)$ sont définies par

$$\alpha(B,\Sigma) = \begin{cases} \frac{1}{B}\arctan\frac{B}{\Sigma} \text{ si } B^2 > 0\ ; \\ \frac{1}{\Sigma} - \frac{B^2}{3\Sigma^3} + \frac{B^4}{5\Sigma^5} - \frac{B^6}{7\Sigma^7} + \ldots \text{ si } B^2 \simeq 0\ ; \\ \frac{1}{Im(\mathbf{B})}\ln\frac{\Sigma + Im(\mathbf{B})}{\Sigma - Im(\mathbf{B})} \text{ si } B^2 < 0\ . \end{cases} \quad (8.16)$$

et

$$\beta(B,\Sigma) = \frac{1}{B^2}\left[1 - \alpha(B,\Sigma)\Sigma\right] \quad (8.17)$$

En substituant l'équation 8.10 dans l'équation 8.13, on obtient finalement la seconde équation du modèle B_1 homogène :

$$\frac{i\mathcal{J}(E)}{B} = \frac{1}{\Sigma(E)\gamma\left[B,\Sigma(E)\right]}\left\{\frac{1}{3}\varphi(E) + \int_0^\infty dE'\Sigma_{s,1}(E\leftarrow E')\frac{i\mathcal{J}(E')}{B}\right\} \quad (8.18)$$

avec

$$\gamma(B,\Sigma) = \frac{1}{3\Sigma}\frac{\alpha(B,\Sigma)}{\beta(B,\Sigma)} \simeq 1 + \frac{4}{15}\left(\frac{B}{\Sigma}\right)^2 - \frac{12}{175}\left(\frac{B}{\Sigma}\right)^4 + \frac{92}{2625}\left(\frac{B}{\Sigma}\right)^6 + \ldots \quad (8.19)$$

Les coefficients de diffusion de Benoist peuvent être introduit en supposant que le flux homogène vérifie l'équation de diffusion $(-D\nabla^2+\Sigma)\phi = Q$. Les coefficients de diffusion vérifient

la loi de Fick :

$$\mathcal{J}(\mathbf{r},E) = -D(\mathbf{r},E)\nabla\phi(\mathbf{r},E) \ . \tag{8.20}$$

Dans le cas d'un milieu infini, homogène, le flux fondamental et le courant fondamental s'écrivent

$$\phi(\mathbf{r},E) = \varphi(E)\exp(i\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}) \ , \tag{8.21}$$

et

$$\mathcal{J}(\mathbf{r},E) = \mathcal{J}(E)\exp(i\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}) \ . \tag{8.22}$$

conduisant ainsi aux coefficients de diffusion :

$$D(\mathbf{r},E) = d(B,E) = \frac{1}{B}\frac{i\mathcal{J}(E)}{\varphi(E)} \ . \tag{8.23}$$

On peut ainsi réécrire la seconde équation B_1 (8.18) :

$$d(B,E) = \frac{1}{3\gamma\left[B,\Sigma(E)\right]\Sigma(E)}\left\{1 + 3\int_0^\infty dE'\Sigma_{s,1}(E \leftarrow E')d(B,E')\frac{\varphi(E')}{\varphi(E)}\right\} \tag{8.24}$$

Les deux équations 8.12 et 8.18 peuvent être résolues via une discretisation multigroupe, où elles s'écrivent

$$\Sigma_g\varphi_g + iB\mathcal{J}_g = \sum_{h=1}^{G}\Sigma_{s,0,g\leftarrow h}\varphi_h + \frac{\chi_g}{K_{eff}}\sum_{h=1}^{G}\nu\sigma_{f,h}\varphi_h \tag{8.25}$$

et

$$d_g = \frac{1}{3\gamma\left[B,\Sigma_g\right]\Sigma_g}\left\{1 + 3\sum_{h=1}^{G}\Sigma_{s,1,g\leftarrow h}\frac{\varphi_h}{\varphi_g} \ ,\right\} \tag{8.26}$$

avec les grandeurs multigroupes suivantes :

$$\varphi_g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE\varphi(E) \tag{8.27}$$

$$d_g = \frac{1}{\varphi_g}\int_{E_g}^{E_{g-1}} dEd(B,E)\varphi(E) \tag{8.28}$$

and

$$\Sigma_g = \frac{1}{\varphi_g}\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE\Sigma(E)\varphi(E) \tag{8.29}$$

Les taux de fuite par groupe s'écrivent naturellement

$$L_g = d_g B^2 \varphi_g \ . \tag{8.30}$$

L'équation 8.25 est un système linéaire qui peut être résolu aisément. Le buckling critique B^2 est itéré jusqu'à arriver à la condition de criticité $k_{\text{eff}} = 1$. Le flux fondamental ainsi obtenu est utilisé dans l'équation 8.26 afin d'obtenir les coefficients de fuite $d_g B^2$.

8.2 Applications au calcul Monte Carlo de criticité

La totalité des codes de réseau utilisés dans les calculs de production dans l'industrie (APOLLO, ECCO, CASMO, HELIOS, WIMS, PARAGON, etc.) permettent l'application d'un modèle de fuite, généralement basé sur l'approximation B_1 homogène. Les constantes par groupe sont ainsi générées aux conditions critiques pour les différents paramètres physiques imposés (burnup, température, concentration de bore, etc.)

Parmi les nombreuses études faites afin de tester et de valider l'utilisation d'un code Monte Carlo pour le calcul de réseau (voir notamment le chapitre 9 de (Leppänen, 2007) pour une liste complète datant de 2007), aucune ne mentionne l'utilisation d'un modèle de fuite. Depuis 2007, plusieurs approches ont été cependant proposées, principalement au KAERI en Corée. Il s'agit donc d'un sujet très récent et qui intéresse de nombreux groupes de recherche travaillant à la définition de schémas de calcul pour le calcul de réacteur reposant sur un code de réseau Monte Carlo. Parmi les études réalisées au KAERI, la première par ordre chronologique est détaillée dans (Shim *et al.*, 2008a). Il s'agit d'une adaptation directe de la méthodologie issue de WIMS et présente dans les codes HELIOS et CASMO, notamment. Le schéma de calcul pour déterminer les constantes par groupe repose sur les étapes suivantes :

1. Le code Monte Carlo à énergie continue McCARD calcule initialement les sections efficaces homogènes nécessaires à la résolution des équations B_1, typiquement la section efficace totale, les matrices de transfert P_0 et P_1, la section efficace de production et le spectre de fission. Ces quantités sont obtenues sur une grille énergétique arbitraire, ici la structure à 47 groupes de HELIOS a été utilisée.
2. Les équations B_1 multigroupes 8.26 et 8.27 sont ensuite résolues, conduisant à un flux critique homogène ainsi qu'aux grandeurs macroscopiques tels que le k_∞ et le B^2 critique.
3. Le flux critique obtenu en (2) sert à condenser les sections efficaces homogènes obtenues en (1) en deux groupes (un rapide et un thermique).

La méthodologie ainsi présentée est appliquée à un calcul de réseau sur un assemblage REP pour deux burnup différents. Les différences relatives obtenues avec McCARD vis-à-vis de HELIOS et CASMO sont de l'ordre du pourcent.

Une autre étude présentée récemment dans (Yun et Cho, 2010) propose de modifier de manière itérative la valeur de l'albédo α afin d'obtenir $k_{\text{eff}} = 1$. Le code MONTEBURNS couplant MCNP5 et ORIGEN est utilisé ici. L'algorithme modifie les conditions aux frontières dans MCNP5 de manière itérative en utilisant une méthode de Lagrange. Les comparaisons sont réalisées essentiellement vis-à-vis du même code non modifié, i.e. sans modèle de fuite, ceci pour deux assemblages REP UOX et MOX qui sont évolués jusqu'à 25 GWj/t. L'impact du modèle de fuite est significatif et influe à la fois le spectre énergétique et la distribution spatiale : les deux variables sont alors couplées, contrairement à ce que l'on obtient dans le cas du modèle B_1 homogène. Les différences obtenues entre le schéma de calcul classique sans fuite et leur approche sont assez importantes, entre 10 et 40% pour les taux de fission et de l'ordre de quelques pourcents pour les inventaires isotopiques des produits de fission en fin de cycle. Les différences sont cependant du même ordre de grandeur que celles obtenues avec le code CASMO, et donc un modèle de fuite B_1 homogène. Cette méthodologie est prometteuse, mais reste encore expérimentale.

Enfin, plusieurs travaux ont été réalisés très récemment au sein du code de réseau Monte Carlo SERPENT. Une première approche disponible depuis la version 1.0 consiste à modifier la valeur de l'albédo pour atteindre $k_{\text{eff}} = 1$, de manière très similaire à l'approche décrite dans (Yun et Cho, 2010). Malheureusement, Leppänen commet une erreur de terminologie en notant cette option « B_1 fundamental mode calculation » dans la documentation du code, alors qu'il s'agit d'une méthode ne reposant pas sur ce modèle. Cette approche ne semblant finalement pas satisfaisante, une collaboration avec le FZD en Allemagne rend finalement disponible dans la version 1.14 la méthode B_1 homogène, implémentée de manière identique à la méthodologie décrite ci-dessus pour McCARD, c'est-à-dire en découplant le calcul en deux étapes.

Bien que reposant également sur le modèle B_1 homogène comme dans (Shim *et al.*, 2008a) ou dans SERPENT version 1.14, l'approche proposée dans cette étude est néanmoins différente des techniques exposées précédemment. Ici, l'algorithme Monte Carlo pour le calcul de criticité reposant sur des itérations de puissance est directement modifié afin de converger sur $k_{\text{eff}} = 1$ et donc sur le flux critique. Cette approche est strictement identique au cas déterministe tel qu'implanté dans DRAGON ou APOLLO2 (voir par exemple (Sanchez *et al.*, 1988) ou (Hébert, 2001)). En effet, contrairement aux codes de réseau issu de WIMS où le calcul est découplé en deux étapes (un calcul sans fuite classique, puis résolution des équations B_1 pour obtenir le flux critique servant à condenser les grandeurs homogènes obtenues initialement), l'approche issue du code APOLLO consiste à introduire à chaque itération de

puissance le terme de fuite $d_g B^2$ dans l'équation de transport multigroupe. L'itération sur le buckling B^2 est réalisé à l'intérieur des boucles sur la valeur propre. Le calcul de valeur propre converge ainsi vers $k_{\text{eff}} = 1$ et le flux obtenu est directement le flux critique.

8.3 Adaptation au calcul Monte Carlo

On présente dans cette section l'approche programmée dans `MC:` afin d'intégrer le modèle de fuite directement au cœur du calcul Monte Carlo de criticité (Martin et Hébert, 2011b). Les équations B_1 sont résolues à chaque cycle. Elles nécessitent pour chaque groupe les sections efficaces homogènes suivantes, calculées durant la marche aléatoire via l'estimateur collision :

- La section efficace macroscopique totale par groupe :

$$\Sigma_g = \frac{\langle \phi_g(\mathbf{r}) \Sigma_g(\mathbf{r}) \rangle_r}{\langle \phi_g(\mathbf{r}) \rangle_r} \tag{8.31}$$

- Les matrices de transfert d'ordre P_0 et P_1 :

$$\Sigma_{s,\ell,g,\leftarrow h} = \frac{\langle \phi_h(\mathbf{r}) \Sigma_{s,\ell,g\leftarrow h}(\mathbf{r}) \rangle_r}{\langle \phi_h(\mathbf{r}) \rangle_r} \quad \text{avec } \ell = 0, 1 \tag{8.32}$$

- La section efficace de production ($\nu \times$ fission) :

$$\nu\Sigma_{f,g} = \frac{\langle \phi_g(\mathbf{r}) \nu\Sigma_{f,g}(\mathbf{r}) \rangle_r}{\langle \phi_g(\mathbf{r}) \rangle_r} \tag{8.33}$$

- Et le spectre de fission :

$$\chi_g = \frac{\langle \phi_g(\mathbf{r}) \chi_g(\mathbf{r}) \nu\Sigma_{f,g}(\mathbf{r}) \rangle_r}{\langle \phi_g(\mathbf{r}) \nu\Sigma_{f,g}(\mathbf{r}) \rangle_r} \tag{8.34}$$

L'algorithme Monte Carlo pour la détermination de la valeur propre peut être résumé par :

- Les sections efficaces homogènes sont scorées à chaque cycle i.
- Après N_{skip} cycles initiaux afin d'assurer la convergence des sources, les grandeurs estimées des sections efficaces sont utilisées afin de résoudre les équations B_1. Le buckling critique B^2 et les coefficients de fuite d_g sont alors évalués. Dans notre approche, les mêmes routines que dans le cas déterministe sont utilisées.
- Les valeurs moyennes des coefficients $d(g)B^2$ obtenues pour les cycles $k \leq i$ sont introduits au cycles suivant $i + 1$.
- Dans chaque groupe g, une réaction additionnelle est ajoutée dépendamment du signe de B^2. Si cette réaction est aléatoirement tirée, alors :

– si $B^2 > 0$, la réaction additionnelle est une fuite fictive, de probabilité

$$P_{leak} = \frac{d_g B^2}{\Sigma_g + d_g B^2} \ .$$

L'histoire du neutron est terminée (le neutron est tué), et son poids est mis à zero.

– si $B^2 < 0$, le terme source est augmenté. Cette réaction est prise en compte en modifiant le poids du neutron source suivant

$$\omega' = \omega \frac{\text{Production}}{\text{Absorption}} = \omega \frac{\nu\Sigma_{f,g} - d_g B^2}{\Sigma_a}$$

Ceci est dû au fait que notre algorithme Monte Carlo tient compte de la multiplication neutronique par augmentation du poids.

Dans tous les cas, cette approche correspond à augmenter la section efficace totale suivant $\Sigma_g^* = \Sigma_g + \text{abs}(d_g B^2)$. Le terme $d_g B^2$ pouvant s'interpréter comme un terme de fuite si B^2 est positif, ou un terme de production si B^2 est négatif. Comme dans le cas de la méthode des probabilités de collision, d'autres techniques sont cependant possibles.

8.4 Résultats numériques

8.4.1 Comparaison vis-à-vis de DRAGON

Les cellules de Rowlands (Rowlands, 1999) sont utilisées afin de tester l'implantation du modèle de fuite B_1 au sein du module `MC:`. Les quatre cas UOX et MOX décris à la section 6.4.1 sont typiquement sur-critiques avec des coefficients de multiplication effectif $k_{\text{eff}} > 1$ lorsqu'aucun modèle de fuite n'est appliqué. Afin de pouvoir tester un cas à buckling négatif, le cas UOX-1 a été modifié de telle sorte que le k_{eff} soit légèrement en dessous de 1. Ceci a été réalisé en diminuant légèrement la densité isotopique de l'isotope ^{235}U à 2.10^{-4} (10^{24} at/cm^3).

La voie de calcul reposant sur la méthode des probabilités de collision du code de réseau DRAGON est utilisée. Les options de calcul détaillées au chapitre 6 sont utilisées ici, avec en addition l'introduction d'un modèle de fuite B_1 homogène au niveau du calcul de flux principal. Ici, l'option par défaut est utilisée et les taux de fuite sont introduits par soustraction du terme $d_g B^2$ des sections efficaces de diffusion, ce qui correspond à la méthode *DIFFON* du code APOLLO2. Les autres techniques disponibles telles que la normalisation du terme de source par la probabilité de non-fuite (option PNL) conduisent de toute manière à des résultats identiques sur les cas Rowlands.

Les grandeurs reportées au tableau 8.1 sont le facteur de multiplication infini k_∞, le buckling critique B^2 et l'aire de migration M^2. On rappelle que l'aire de migration, le k_{eff} et le k_∞ sont reliés par

$$k_{\text{eff}} = \frac{k_\infty}{1 + M^2 B^2} \ . \tag{8.35}$$

Pour chaque quantité R (k_{eff}, B^2 et M^2), la différence relative entre les résultats Monte

Tableau 8.1 Grandeurs macroscopiques obtenues par `MC:` et `CP:`

	DRAGON `MC:`				DRAGON `CP`		
Case	k_∞	B^2	M^2	k_{eff} (σ en %)	k_∞	B^2	M^2
UO2-1	1.38290	1.0057e-2	3.8074e+1	1.00084 (0.03)	1.38231	9.6309e-3	3.9697e+1
UO2-2	1.33209	5.6298e-3	5.8987e+1	0.99977 (0.03)	1.33053	5.2991e-3	6.2374e+1
UO2-3	1.30089	5.1075e-3	5.8910e+1	1.00091 (0.03)	1.29921	4.8066e-3	6.2250e+1
UO2-4	1.31429	5.3041e-3	5.9254e+1	1.00051 (0.03)	1.31214	4.9902e-3	6.2552e+1
MOX-1	1.22986	4.1963e-3	5.4778e+1	1.00035 (0.03)	1.22937	3.9795e-3	5.7637e+1
MOX-2	1.21508	3.9435e-3	5.4540e+1	1.00030 (0.03)	1.21503	3.7483e-3	5.7367e+1
MOX-3	1.27276	4.9288e-3	5.5341e+1	0.99921 (0.03)	1.27222	4.6737e-3	5.8246e+1
MOX-4	1.25874	4.6966e-3	5.5091e+1	0.99976 (0.03)	1.25832	4.4545e-3	5.7991e+1
Subcrit.	0.99215	-2.0574e-4	3.8153e+1	1.00087 (0.03)	0.99179	-2.0810e-4	3.9464e+1

Carlo et ceux obtenus par la méthode des probabilités de collision est calculée suivant

$$\delta(\%) = 100 \times \frac{R^{\text{mc}} - R^{\text{cp}}}{R^{\text{cp}}} \ . \tag{8.36}$$

Tableau 8.2 Différences relatives entre `MC:` et `CP:`

Cas	δ vs. CP, k_∞	δ vs. CP, B^2	δ vs. CP, M^2
UO2-1	0.04	4.9	-4.0
UO2-2	0.12	6.2	-5.4
UO2-3	0.13	6.3	-5.3
UO2-4	0.16	6.2	-5.3
MOX-1	0.03	5.5	-4.9
MOX-2	0.004	5.1	-5.1
MOX-3	0.04	5.8	-5.0
MOX-4	0.03	5.6	-5.0
Subcrit.	0.03	-0.9	-3.0

On voit au tableau 8.2 que les facteurs de multiplication infinis k_∞ sont cohérents entre les deux calculs, avec des différences relatives très faibles. Les buckling critiques B^2 sont aussi cohérents, bien que l'on observe systématiquement une surestimation par le calcul Monte Carlo d'environ 5%. Il faut cependant se rappeler que les ordres de grandeurs du buckling sont de l'ordre de 10^{-2} à 10^{-3} pour ces cas REP. Etant donné que les k_∞ sont similaires, les aires de migrations présentent à peu près les mêmes différences relatives que pour les buckling critiques B^2 (au signe près).

Les grandeurs générées par un code spectral et utiles pour un calcul de cœur sont les sections efficaces homogénéisées sur l'assemblage ou la cellule, et condensées à deux groupes. Il est donc naturel de comparer les quantités générées par les deux voies de calcul. On compare ainsi les sections efficaces totales, d'absorption et de production obtenues par le code `MC:` avec celles générées par la chaîne de calcul reposant sur la méthode P_{ij}.

Tableau 8.3 Comparaison des sections efficaces générées par `MC:` et `CP:`

	cas UO2-1		
	`MC:`($\frac{\sigma(\bar{x})}{\bar{x}}$ en %)	`CP:`	δ : Rel. diff.(%)
$\Sigma_{t,1}$	6.5856e-1 (0.02)	6.6746e-1	-1.33
$\Sigma_{t,2}$	1.9398e+0 (0.04)	1.9295e+0	0.53
$\Sigma_{a,1}$	9.9902e-3 (0.03)	1.0175e-2	-1.83
$\Sigma_{a,2}$	1.1418e-1 (0.04)	1.1501e-1	-0.72
$\nu\Sigma_{f,1}$	7.8144e-3 (0.03)	7.7248e-3	1.16
$\nu\Sigma_{f,2}$	1.9219e-1 (0.04)	1.9385e-1	-0.86
	cas MOX-1		
$\Sigma_{t,1}$	5.1310e-1 (0.02)	5.1760e-1	-0.84
$\Sigma_{t,2}$	1.6412e+0 (0.07)	1.6345e+0	0.41
$\Sigma_{a,1}$	1.6011e-2 (0.04)	1.6235e-2	-1.38
$\Sigma_{a,2}$	3.6829e-1 (0.05)	3.7156e-1	-0.88
$\nu\Sigma_{f,1}$	1.5503e-2 (0.04)	1.5531e-2	-0.18
$\nu\Sigma_{f,2}$	6.2438e-1 (0.05)	6.3008e-1	-0.90

Tableau 8.4 Comparaison des sections efficaces générées par `MC:` et `CP:` (sans fuite)

	cas UO2-1		
	`MC:`($\frac{\sigma(\bar{x})}{\bar{x}}$ en %)	`CP:`	δ : Rel. diff.(%)
$\Sigma_{t,1}$	6.7847e-1 (0.02)	6.8042e-1	0.56
$\Sigma_{t,2}$	1.9419e+0 (0.04)	1.9311e+0	-0.29
$\Sigma_{a,1}$	1.0669e-2 (0.03)	1.0665e-2	0.04
$\Sigma_{a,2}$	1.1444e-1 (0.04)	1.1528e-1	-0.73
$\nu\Sigma_{f,1}$	7.9797e-3 (0.03)	7.9327e-3	0.59
$\nu\Sigma_{f,2}$	1.9264e-1 (0.04)	1.9432e-1	-0.86
	cas MOX-1		
$\Sigma_{t,1}$	5.2304e-1 (0.02)	5.2261e-1	0.08
$\Sigma_{t,2}$	1.6418e+0 (0.07)	1.6344e+0	0.45
$\Sigma_{a,1}$	1.6885e-2 (0.04)	1.6895e-2	-0.06
$\Sigma_{a,2}$	3.6806e-1 (0.05)	3.7162e-1	-0.96
$\nu\Sigma_{f,1}$	1.5931e-2 (0.04)	1.5954e-2	-0.15
$\nu\Sigma_{f,2}$	6.2404e-1 (0.05)	6.3016e-1	-0.97

Les résultats présentés aux tableaux 8.3 pour le cas UOX-1 et MOX-1 sont en très bon accord pour les deux méthodes. Les différences sont du même ordre de grandeur que ceux observées sans modèle de fuite et exposés au tableau 8.4. On compare également les flux fondamentaux homogènes obtenus dans les deux cas (avec ou sans modèle de fuite). Les figures 8.1 et 8.2 illustrent le fait que l'introduction d'un modèle de fuite B_1 homogène conduit à un déplacement du spectre similaire pour les cas Monte Carlo et déterministe. Le flux obtenu aux conditions critiques présente des différences significatives vis-à-vis du flux obtenu dans le cas sans fuite, justifiant ainsi l'introduction d'un tel modèle.

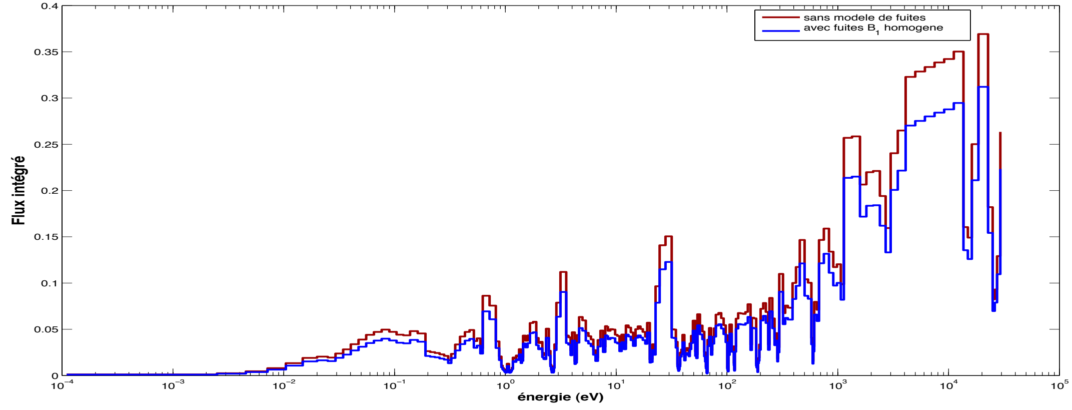


Figure 8.1 Flux avec ou sans modèle B_1, Monte Carlo

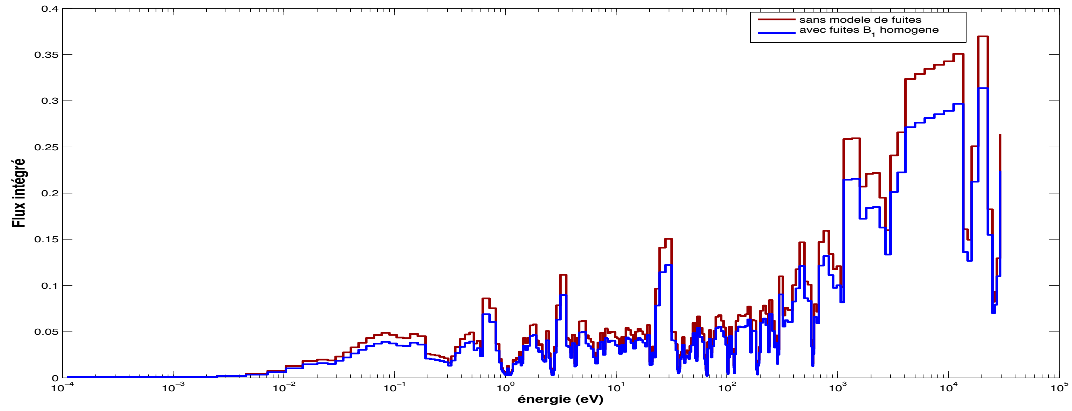


Figure 8.2 Flux avec ou sans modèle B_1, P_{ij}

8.4.2 Comparaison vis-à-vis du code SERPENT

La version 1.14 du code SERPENT dispose également d'un modèle de fuite basé sur l'approximation B_1 homogène. Le calcul s'effectue en deux étapes, à savoir un calcul Monte Carlo classique (sans fuites) du coefficient de multiplication effectif et des grandeurs macroscopiques nécessaires, puis la résolution proprement dite des équations B_1 conduisant au flux critique par itération du B^2. Les données disponibles dans les listings de SERPENT sont essentiellement le B^2 critique, les sections efficaces macroscopiques condensées sur la structure souhaitée (typiquement deux groupes), et les coefficients de diffusion. On compare au tableau 8.5 les valeurs des coefficients B^2 obtenus dans les deux codes pour les cas Rowlands.

Tableau 8.5 Coefficients B^2 pour les cas Rowlands

Cas	B^2 `MC:`	B^2 SERPENT	B^2 `CP:`
UO2-1	1.0057e-2	1.0029e-2	9.6309e-3
UO2-2	5.6298e-3	5.5721e-3	5.2991e-3
UO2-3	5.1075e-3	5.0407e-3	4.8066e-3
UO2-4	5.3041e-3	5.2234e-3	4.9902e-3
MOX-1	4.1963e-3	4.1277e-3	3.9795e-3
MOX-2	3.9435e-3	3.8707e-3	3.7483e-3
MOX-3	4.9288e-3	4.8587e-3	4.6737e-3
MOX-4	4.6966e-3	4.6267e-3	4.4545e-3
Subcrit.	-2.0574e-4	-3.3591e-4	-2.0810e-4

On remarque que les valeurs concordent entre les codes DRAGON et SERPENT. La méthodologie implémentée dans SERPENT a été semble-t-il validée vis-à-vis de HELIOS, mais les résultats n'ont pas encore été publiés. On considère ici que les résultats obtenus via la méthode des probabilités de collision comme référence, et au final les trois chaînes de calcul produisent des résultats cohérents, excepté le cas sous-critique où le coefficient B^2 est sous évalué dans SERPENT. Les cas assemblages MOX et UOX présentés au chapitre 6 sont également analysés via le code `MC:` et SERPENT. Ces cas sont pertinents ici car ils représentent des cas d'assemblage typiques REP à burnup de 25MWj/t. On compare ainsi les grandeurs macroscopiques générées par les deux codes Monte Carlo `MC:` et SERPENT. Les valeurs reportées au tableau 8.6 sont cohérentes entre les deux codes, avec une erreur relative maximale de l'ordre du % pour les grandeurs macroscopiques. On remarque ainsi que l'approche implémentée dans SERPENT conduit à des résultats compatibles à ceux obtenus via la stratégie du code DRAGON.

Tableau 8.6 Comparaison des sections efficaces générées par MC: et SERPENT

	cas UO2-1		
	MC:	SERPENT	δ : Rel. diff.(%)
B^2	5.6000e-4	5.3529e-4	4.6
$\nu\Sigma_{f,1}$	5.2440e-3	5.2624e-3	-0.35
$\nu\Sigma_{f,2}$	1.3885e-1	1.3986e-1	-0.72
$\Sigma_{a,1}$	1.0200e-2	1.0391e-2	-1.8
$\Sigma_{a,2}$	9.9925e-2	1.0067e-1	-0.74
	cas MOX-1		
B^2	2.9028e-3	2.8472e-3	1.9
$\nu\Sigma_{f,1}$	8.3740e-3	8.3830e-3	-0.11
$\nu\Sigma_{f,2}$	3.2897e-1	3.3503e-1	-1.8
$\Sigma_{a,1}$	1.2128e-2	1.2350e-2	-1.8
$\Sigma_{a,2}$	2.0408e-1	2.0761e-1	-1.7

L'étude présentée dans ce chapitre permet de prouver qu'il est possible d'utiliser un modèle de fuite B_1 homogène dans un algorithme Monte Carlo, de manière rigoureusement identique au cas déterministe. Il serait néanmoins intéressant de tester cette approche dans un cadre plus large, typiquement pour différentes valeurs de burnup, ce qui sera possible après couplage du solveur MC: avec un module d'évolution. Enfin, il serait intéressant de proposer un modèle de fuite directement conçu pour la méthode Monte Carlo. Les approches ne reposant pas sur l'approximation B_1 homogène comme celles basées sur la modification itérative de l'albédo sont en ce sens prometteuses et facilement applicables à n'importe quel code Monte Carlo. On pourrait ainsi tenir compte des effets de fuites hétérogènes, nécessaire pour les réacteurs à spectre rapide par exemple.

CHAPITRE 9

CONCLUSION

Dans ce projet, nous avons démontré la possibilité d'utiliser un algorithme Monte Carlo utilisant une représentation sous forme de tables de probabilité pour les sections efficaces, dans le cadre général du calcul de réseau et de criticité. Nous avons jeté les bases d'un code de réseau entièrement basé sur la méthode de Monte Carlo, comme alternative aux approches déterministes actuellement utilisées. Plusieurs points ont été étudiés en détail et sont résumés ci-dessous.

L'utilisation d'un maillage énergétique comprenant uniquement 295 groupes est possible et n'entraîne pas de source d'erreur vis-à-vis de la méthode Monte Carlo à énergie continue et des méthodes déterministes classiques. Nous avons ainsi pu recycler une grande partie du travail réalisé dans la définition du maillage SHEM et ses dérivés à 295 et 361 groupes, originellement conçus pour les schémas de calculs REP avec combustible UOX et MOX. La quasi-totalité des résultats démontrés dans cette étude sont basés sur le maillage SHEM–295. Celui-ci comprend en effet un plus grand domaine où les tables de probabilité sont nécessaires (typiquement entre 4.6 eV et 11.14 KeV), alors que le domaine fin multigroupe est repoussé à 22.5 eV dans le cas SHEM–361. Il est donc clair que les résultats obtenus avec SHEM–361 seront similaires.

L'algorithme Monte Carlo s'est révélé particulièrement sensible aux méthodes invoquées pour calculer ces tables de probabilité. La méthode des moments est la technique numérique la plus adéquate pour générer des tables de probabilité cohérentes. La précision des calculs réalisés à l'aide du code Monte Carlo programmé dans cette étude est directement reliée à la qualité des données d'entrée. Ceci est bien sûr valable pour tout code de transport. La robustesse de l'approche CALENDF a déjà été prouvée dans d'autres études et est due essentiellement à sa base mathématique solide. En effet, le calcul d'une table de probabilité est relié au problème des moments et par application des propriétés des polynômes orthogonaux, on obtient équivalence entre table de probabilité et quadrature de Gauss pour la variable énergie. A l'inverse, les techniques basées sur la conservation d'un certain nombre de valeur de dilutions prétabulées dans NJOY conduisent à de mauvais résultats dans le code `MC:`. Ceci est dû principalement à l'apparition de poids légèrement négatifs, typiquement dans les groupes où l'ordre de la table de probabilité est important (généralement pour l'^{238}U). Un remplacement

graduel de l'approche RMS par l'approche CALENDF a finalement réduit les erreurs observées. Il est cependant certain qu'un travail important de préparation des données pourrait être réalisé en amont du code de réseau, en redéfinissant par exemple de manière propre le calcul des tables de probabilité. Si la stratégie implantée dans le module `LIB:` et consistant à recalculer à chaque fois les tables de probabilité n'est pas forcément très coûteuse, elle reste peu optimisée. L'Assurance Qualité serait renforcée si l'on disposait de librairies d'entrée figées contenant les tables de probabilité pour chaque isotope. La problématique des codes de préparation de données d'entrée pour les codes de transport dépasse largement le cadre de cette étude et est au cœur des projets de modernisation des outils en neutronique (voir les projets GALILEE du CEA et AMPX-2000 de ORNL).

L'utilisation des poids corrélés entre deux isotopes résonnants conduit à une légère amélioration des résultats. On rappelle que ce formalisme est utile afin de tenir compte de l'effet d'auto-protection mutuelle (effet d'interférence), intervenant lorsque plusieurs résonances se superposent dans un groupe considéré. Néanmoins, l'impact de ces poids corrélés est moindre que dans le cas des méthodes d'auto-protection du module `USS:`. Ceci s'explique encore une fois par la mauvaise qualité de certaines matrices de poids corrélés, l'algorithme pouvant conduire dans les cas d'ordres élevés à des poids légèrement négatifs. Cependant, les structures SHEM sont en partie optimisées et tiennent compte directement de ce phénomène, même s'il reste quelques recouvrements importants (typiquement dans SHEM–295 entre 4.6 et 22.5 eV). Au final, les tables de probabilité classiques sont suffisantes dans toutes les configurations testées dans cette étude. Similairement au cas déterministe, l'utilisation des poids corrélés peut être considérée comme voie de calcul expérimentale.

Il est possible de prendre en compte l'anisotropie de la diffusion par la méthode des angles discrets dans un code Monte Carlo reposant sur des sections efficaces sous forme de tables de probabilité. Dans ce cas, les moments de Legendre des coefficients de la matrice de transfert servent à calculer une table de probabilité pour la densité angulaire. La méthode CALENDF peut encore une fois être appliquée, avec cette fois-ci une série de tests préliminaires afin de vérifier si les moments de Legendre sont incohérents. Dans ces cas, il est tout à fait légitime de supplanter la méthode des angles discrets par des méthodes semi-analytiques comme la méthode de Coveyou (conservation jusqu'à l'ordre P_1) ou la méthode de Lux (conservation des moments jusqu'à l'ordre P_3). Un ordre faible, typiquement P_1 par application de la méthode de Coveyou, est suffisant dans la majorité des cas de réacteurs thermiques. Dans les cas du calcul de criticité-sûreté, un développement P_5 et donc la méthode des angles discrets sont néanmoins nécessaires. L'approche étudiée ici est une adaptation directe des méthodes

dérivées initialement pour les codes Monte Carlo multigroupes, où les données sont fournies par un code de réseau. Il est cependant possible (et plus élégant) d'utiliser les informations ponctuelles dans le cas d'un code Monte Carlo reposant sur la méthode des sous-groupes. Ceci nécessiterait par contre d'avoir accès aux mêmes données que les codes ponctuels, typiquement les tables de probabilité pour le cosinus de diffusion en fonction de l'énergie incidente (dans le référentiel du centre de masse). On aurait alors un code Monte Carlo utilisant les sections efficaces sous forme de tables de probabilité pour déterminer le libre parcours moyen, l'isotope collisionné et le type de réaction, tandis que les lois d'anisotropie ponctuelle seraient utilisées dans le cas de la diffusion (élastique et inélastique). Les lois de la cinématique permettent de recalculer l'énergie secondaire et donc d'obtenir une représentation continue de la variable énergie. L'approche reposant sur les méthodes D.A.T. ou semi-analytiques pourrait cependant se révéler plus simple si l'on désire dériver un algorithme Monte Carlo adjoint.

Il est possible d'utiliser un modèle de fuite basé sur l'approximation B_1 homogène au sein d'un code Monte Carlo. L'approche retenue et testée dans cette étude a conduit à proposer une adaptation originale d'un modèle de fuite B_1 homogène directement au niveau des itérations de puissance. Il s'agit d'une traduction directe du modèle déterministe au cas Monte Carlo. Avec cette approche, une définition naturelle des coefficients de diffusion apparaît. Les résultats ont été établis équivalents aux cas déterministes. Etant donné la relative nouveauté de cette problématique, il est probable que d'autres modèles de fuite spécifiquement conçus pour l'approche Monte Carlo apparaissent dans les prochaines années.

Enfin, les temps de calcul obtenus avec la méthode Monte Carlo avec tables de probabilité ont été établis très satisfaisants. En pratique, l'implémentation d'une voie « tables de probabilité » dans un code Monte Carlo mature doit ainsi conduire à des temps CPU intermédiaire entre la voie ponctuelle et la voie multigroupe. Même sur les assemblages MOX et UOX évolués jusqu'à 25GWJ/KgU comprennant plusieurs centaines de régions résonnantes avec des dizaines de produits de fission, la combinaison de la méthode de delta-tracking avec un tirage dans les tables de probabilité n'entraîne pas de surcoût important. Les temps CPU observés avec `MC:` sont équivalents à ceux obtenus avec SERPENT et sont à peu près un cinquième de ceux observés avec MCNP5. Les codes déterministes utilisent des schémas multi-niveaux optimisés pour le calcul de réacteur REP. On note cependant que la voie de « référence » architecturé autour de la méthode des caractéristique exposée dans les études (Vallerent, 2009; Reysset, 2009) est largement plus coûteuse que la voie Monte Carlo. Les performances en terme de coût CPU d'un code Monte Carlo sont extrêmement dépendantes de la qualité de la programmation, et une amélioration constante des temps

de calcul dans `MC:` a été observée tout au long de ce projet. Il est probable que d'autres améliorations seront introduites dans le futur. A titre d'exemple, le code SERPENT bénéficie de plusieurs années de développement et d'un retour d'expérience invoquant plusieurs dizaines d'utilisateurs. Les performances obtenues avec ce code viennent remettre tout simplement en cause l'argumentaire classique et ouvre la voie au calcul de réseau par des méthodes Monte Carlo, ce qui était impensable il y a quelques années seulement. Certains concepts de réacteurs comme les VHTR représentent un défi pour les codes de réseau déterministes actuels (voir par exemple (Lajoie *et al.*, 2010) pour une étude faite avec DRAGON), et de nombreuses études sont actuellement en cours pour utiliser un code Monte Carlo de génération de données macroscopiques.

CHAPITRE 10

ÉTUDES EN COURS ET FUTURES

Le travail de validation de la méthode Monte Carlo introduite dans cette étude s'est fait sur des cas relativement classiques de calcul de réseau et de criticité. D'autres études non détaillées dans ce rapport ont porté sur l'analyse de cellules de réacteurs à spectre rapide de type SFR. Une étude est également poursuivie à l'IRSN concernant le développement de méthode de réduction de variance pour le calcul Monte Carlo de criticité (Jinaphanh *et al.*, 2011). Une des approches actuellement testée consiste à récupérer le flux adjoint, calculé par une méthode déterministe comme la méthode S_N ou la méthode des caractéristiques, pour appliquer un biaisage de la marche aléatoire Monte Carlo (méthode connue sous le terme d'*importance sampling technique*). Une autre application consiste à modifier le placement initial des sources selon le flux adjoint, permettant ainsi de diminuer voir même d'éliminer les cycles initiaux nécessaires afin d'assurer la convergence des sources avec la méthode classique des itérations de puissance.

Ces problématiques sont des sujets de recherche en vogue, notamment pour le calcul de criticité où les milieux fissiles peuvent être faiblement couplés et où une mauvaise convergence des sources peut conduire à une sous-estimation du k_{eff}. Les méthodes de réduction de variance basées sur l'utilisation du flux adjoint ont été initialement proposées pour les problèmes de protection, et sont en cours d'adaptation au calcul de valeur propre. Les techniques invoquées généralement reposent sur le couplage de différents codes tels que MCNP et TORT. Ici, on dispose dans le même code des différentes techniques de résolution, et il est probable qu'il s'agisse d'un des premiers outils de ce genre.

Il serait également pertinent d'ajouter la possibilité d'effectuer des calculs d'évolution avec le solveur Monte Carlo de DRAGON. Il serait à ce titre possible de réaliser un couplage avec le module `EVO:`, déjà disponible et validé pour les calculs déterministes. Dans ce cas, toutes les réactions partielles nécessaires à la résolution des équations de Bateman doivent être encaissées pendant la marche aléatoire, et sauvées dans un format compatible avec `EVO:`. L'utilisation d'une grille multigroupe devrait simplifier le couplage du code stochastique avec le solveur des équations d'évolution du champ isotopique, comparativement aux études faites avec des codes Monte Carlo à énergie continue (Haeck et Verboomen, 2007; Haeck, 2007). Par ailleurs, la représentation des isotopes résonnants sous forme de tables de probabilité

permettrait à ce niveau un gain important en terme de coût de calcul et de mémoire.

Prendre en compte l'évolution du combustible dans un code Monte Carlo est coûteux en terme de temps de calcul, car l'on cherche à obtenir une évaluation correcte d'un nombre important de réactions isotopiques partielles. Les taux de réaction doivent donc être convergés et les paramètres de simulation doivent être suffisants (nombre de neutrons/cycle important). Pour cela, la parallélisation du code Monte Carlo doit être envisagée au préalable. L'approche générale est largement décrite dans la littérature, et consiste à paralléliser le code au niveau de la marche aléatoire des neutrons. La répartition s'effectue typiquement par division des M neutrons par cycle suivant les P processeurs. La librairie OpenMP est généralement utilisée, avec dans le cas de MCNP la possibilité d'utiliser en plus le standard MPI. Etant donné que `MC:` est programmé en Fortran 2003, on pourrait aussi considérer le standard Fortran Co-Array, sensé être disponible sous peu dans gfortran. On obtiendrait ainsi un code Monte Carlo de troisième génération optimisé pour le calcul de réacteur.

Enfin, l'utilisation d'un algorithme Monte Carlo pour le calcul de réseau nécessite de s'intéresser à la question de la propagation de l'erreur statistique. On pense ici à la chaîne classique où les grandeurs homogénéisées calculées par un code Monte Carlo sont associées à une erreur statistique et utilisées dans un algorithme basé sur une méthode nodale (ou autre), mais aussi au calcul d'évolution, où une erreur statistique importante pour un taux de réaction quelconque en début de cycle peut impacter de manière significative le bilan isotopique final.

RÉfÉRENCES

AKHIEZER, N. I. (1965). *The Classical Moment Problem and Some Related Questions in Analysis*. Oliver & Boyd Ltd., Edinburgh and London.

ALLAIRE, G. et BAL, G. (1997). Homogénéisation d'une équation spectrale du transport neutronique. *Compte-rendu de l'Académie des Sciences de Paris*, 325(I), 1043–1048.

ARSENAULT, B. et LE TELLIER, R. (2008). *Delta-Tracking Technique for Monte Carlo Calculations Applied to Neutron-Transport Simulations* . Rapport technique 153-123310-440-001, EACL.

ARSENAULT, B., LE TELLIER, R. et HÉBERT, A. (2008). Efficiency of the Delta-Tracking technique for Monte Carlo Calculations Applied to Neutron Transport Simulations of the Advanced CANDU Reactor Design. *PHYSOR-2008, Int. Conf. on the physics of reactors*. Interlaken, Switzerland,September 14-19.

BAKER, G. (1975). *Essentials of Padé Approximants*. Academic Press.

BIELAJEW, F. A. (2001). *Fundamentals of the Monte Carlo Method for Neutral and Charged Particle Transport*. Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences, University of Michigan, Michigan.

BROCKMANN, H. (1981). Treatment of Anisotropic Scattering in Numerical Neutron Transport Theory. *Nuclear Science and Engineering*, 77, 377–414.

BROWN, F. (2009). *Fundamentals of Monte Carlo Particle Transport*. Rapport technique LA-UR-05-4983, Los Alamos National Laboratory.

CASAL, J., STAMM'LER, E., VILLARINO, A. et FERRI, A. (1991). HELIOS : Geometric Capabilities of a New Fuel-Assembly Program. *Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematics, Computation, and Reactor Physics*. Pittsburgh, Pennsylvania, Vol. 2, p. 10.2 1–1.

CHIBA, G. (2003). A Combined Method to Evaluate the Resonance Self Shielding Effect in Power Fast Reactor Fuel Assembly Calculation. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 40(7), 537–543.

CHIBA, G. et KUGO, T. (2010). Neutronic Calculations for Steel-reflected Fast Critical Systems with the Sub-group S_N method. *PHYSOR 2010 - Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance*. Pittsburgh, PA, USA, on CD–ROM.

CULLEN, D. (1974). Application of the Probability Table Method to Multigroup Calculations of Neutron Transport. *Nuclear Science and Engineering*, 55, 387–400.

CULLEN, D. (1977). *Calculation of Probability Table Parameters to Include Intermediate Resonance Self-Shielding*. Rapport technique UCRL-79761, Lawrence Livermore National Laboratory.

CULLEN, D. (1986). *Nuclear Cross Section Processing, Handbook of Nuclear Reactor Calculation, vol. I.* Yigal Ronen, CRC Press, inc., Boca Raton, Florida.

CULLEN, D. (2005). *TART2005 : A Coupled Neutron-Photon 3-D, Combinatorial Geometry, Time Dependent Monte Carlo Transport Code*. Rapport technique UCRL-SM-218009, Lawrence Livermore National Laboratory.

CULLEN, D. E., P. G. (1980). The Multiband Method in Radiative Transfer Calculations. *J. Quant. Spect. Radiat. Transfer*, 24, 97–117.

DIOP, C., PETIT, O., JOUANNE, C. et COSTE-DELCLAUX, M. (2010). Adjoint Monte Carlo Neutron Transport Using cross-section Probability Table Representation. *Annals of Nuclear Energy*, 37, 1186–1196.

FORESTIER, B., MISS, J., BERNARD, F., DORVAL, A., JACQUET, O. et VERBOOMEN, B. (2008). Criticality Calculations on Pebble-bed HTR-PROTEUS Configuration as a Validation for the Pseudo-scattering Tracking Method Implemented in the MORET 5 Monte Carlo Code. *PHYSOR-2008, Int. Conf. on the physics of reactors*. Interlaken, Switzerland.

GRIMSTONE, M., TULLETT, J. et RIMPAULT, G. (1990). Accurate Treatments of Fast Reactor Fuel Assembly with the ECCO Cell Code. *Proc. Int. Conf. Physics of Reactors : Operation, Design and Computation, PHYSOR 1990*. Marseille, France, April 23-27.

HAECK, W. (2007). *An Optimum Approach to Monte Carlo Burn-Up*. Thèse de doctorat, Ghent University.

HAECK, W. et VERBOOMEN, B. (2007). An Optimum Approach to Monte Carlo Burn-Up. *Nuclear Science and Engineering*, 156, 180–196.

HALSALL, M. J. (1995). The WIMS Subgroup Method for Resonance Absorption. *Transactions of the American Nuclear Society*, 72, 354.

HÉBERT, A. (2001). Isotropic Streaming Effects in Thermal Lattices. *Proc. ANS Int. Mtg. on Mathematical Methods for Nuclear Applications (M&C)*. Salt Lake City, Utah, USA.

HÉBERT, A. (2005). The Ribon Extended Self-Shielding Model. *Nuclear Science and Engineering*, 151, 1–24.

HÉBERT, A. (2007). A Review of Legacy and Advanced Self-Shielding Models for Lattice Calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 155, 310–320.

HÉBERT, A. (2008). Development of the Subgroup Projection Method for Resonance Self-shielding Calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 162, 56–75.

HÉBERT, A. (2009). *Applied Reactor Physics.* Presses internationales de l'École Polytechnique, Montréal.

HÉBERT, A. et COSTE, M. (2002). Probability Tables for Self-Shielding Calculations in Lattice Codes. *Nuclear Science and Engineering*, 142, 242.

HÉBERT, A. et ROY, R. (2009). *The GANLIB version 5 developer's guide*. Rapport technique IGE-313, École Polytechnique de Montréal.

HÉBERT, A. et SANTAMARINA, A. (2008). Refinement of the Santamarina-Hfaiedh energy mesh between 22.5 eV and 11.4 KeV. *PHYSOR-2008, Int. Conf. on the physics of reactors*. Interlaken, Switzerland.

HÉBERT, A. et SAYGIN, H. (1992). Development of Dragr for the Formatting of DRAGON Cross Section Libraries. *Seminar on NJOY-91 and THEMIS for the Processing of Evaluated Nuclear Data Files*. Saclay, France.

HFAIEDH, N. et SANTAMARINA, A. (2005). Determination of the Optimized SHEM Mesh for Neutron Transport Calculations. *M&C-2005, International Topical Meeting in Mathematics and Computations*. Avignon, France. (Proceedings available on CD-Rom).

JINAPHANH, A., MARTIN, N., HÉBERT, A., MISS, J. et RICHET, Y. (2011). Exploring the Use of a Deterministic Adjoint Flux Calculation in Criticality Monte Carlo Simulations. *submitted to M&C 2011*. Rio de Janeiro.

KOROBEINIKOV, V. et NIKOLAEV, M. N. (1979). Experience in Using the Subgroup Approach to Describe Neutron Cross Sections in Calculations by the Monte Carlo method. *Statistical Modeling in Mathematical Physics*, 132–139.

LAJOIE, M. A., MARTIN, N., MARLEAU, G. et HÉBERT, A. (2010). Application of 3D Collision Probability Method to VHTR Spherical Geometries. *PHYSOR-2010, International Topical Meeting in Reactor Physics*. Pittsburgh, PA. (Proceedings available on CD-Rom).

LARSEN, E. W. (1975). Neutron transport and diffusion in inhomogeneous media. *International Journal in Mathematics for Physics*, 16(7), 1421–1427.

LE COCQ, A. (1998). *Contributions au développement des méthodes de Monte Carlo pour les études de Criticité*. Thèse de doctorat, Université de Paris-sud.

LEPPÄNEN, J. (2007). *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code.* Thèse de doctorat, Helsinki University of Technology.

LEPPÄNEN, J. (2009). Two practical methods for unionized energy grid construction in continuous-energy Monte Carlo neutron transport calculation. *Annals of Nuclear Energy*, 36, 878–885.

LEPPÄNEN, J. (2010a). Performance of Woodcock Delta-Tracking in Lattice Physics Applications Using the Serpent Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code. *Annals of Nuclear Energy*, 37, 715–722.

LEPPÄNEN, J. (2010b). *PSG2 / Serpent : a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code*. Rapport technique 1.1.14 Version, VTT Technical Research Centre of Finland.

LEVITT, L. (1972). The Probability Table Method for Treating Unresolved Neutron Resonances in Monte Carlo Calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 49, 450.

LEWIS, E. E. et MILLER JR., W. F. (1993). *Computational Methods of Neutron Transport, 2nd edition.* John Wiley & Sons, Inc., New York.

LI, M. (1998). *Contribution à la résolution de l'équation de Boltzmann en multigroupe par les méthodes déterministes et Monte Carlo.* Thèse de doctorat, CEA-N-2836.

LIVOLANT, M. et JEANPIERRE, F. (1974). *Autoprotection des résonances dans les réacteurs nucléaires. Application aux isotopes lourds*. Rapport technique CEA-R-4533, Commissariat à l'énergie atomique.

LUNÉVILLE, L. (1998). *Méthode Multibande aux Ordonnées Discrètes. Formalisme et Résultats*. Rapport technique CEA-N-2832, CEA.

LUX, I. (1982). Semicontinuous Selection of Scattering Angles from Low-Order P_n Scattering Densities. *Nuclear Science and Engineering*, 82, 332–337.

LUX, I. et KOBLINGER, L. (1990). *Monte Carlo Particle Transport Methods : Neutron and Photon Calculations.* CRC Press, Boston.

MACFARLANE, R. E. et MUIR, D. W. (2000). *NJOY99.0 Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Cross Sections from ENDF/B Data*. Rapport technique PSR-480/NJOY99.0, Los Alamos National Laboratory.

MARLEAU, G., HÉBERT, A. et ROY, R. (1992). New Computational Methods Used in the Lattice Code DRAGON. *Topical Meeting on Advances in Reactor Physics.* Charleston, South Carolina, 1.177.

MARLEAU, G., HÉBERT, A. et ROY, R. (2006). *A User Guide for DRAGON Version 4*. Rapport technique IGE-294, École Polytechnique de Montréal.

MARTIN, N. et HÉBERT, A. (2010a). An Investigation on the Use of Probability Table Cross-sections in Monte Carlo Lattice Calculations. *PHYSOR-2010, International Topical Meeting in Reactor Physics.* Pittsburgh, PA. (Proceedings available on CD-Rom).

MARTIN, N. et HÉBERT, A. (2010b). Probability Table Monte Carlo Method Applied to CANDU-6 Cell Calculations. *31st CNS Annual Conference.* Montréal, QC. (Proceedings available on CD-Rom).

MARTIN, N. et HÉBERT, A. (2011a). A Monte Carlo lattice code with probability tables and optimized energy meshes. *Nuclear Science and Engineering*, 167, 177–195.

MARTIN, N. et HÉBERT, A. (2011b). Adaptation of the B_1 Leakage Model to Monte Carlo Criticality Calculations. *submitted to M&C 2011*. Rio de Janeiro.

MARTIN, N., HÉBERT, A., FERNEX, F., BERNARD, F. et MISS, J. (2009). Application of Advanced Self-shielding Models to Criticality-Safety Studies. *M&C-2009, International Topical Meeting in Mathematics and Computations*. Saratoga Springs, New York, USA. (Proceedings available on CD-Rom).

MARTIN, N., MISS, J. et HÉBERT, A. (2011a). Moment-based Probability Tables for Angular Anisotropic Scattering. *Annals of Nuclear Energy*, to be published.

MARTIN, N., MISS, J. et HÉBERT, A. (2011b). The Discrete Angle Technique Combined with the Subgroup Monte Carlo Method. *submitted to M&C 2011*. Rio de Janeiro.

METROPOLIS, N. (1987). The Beginning of the Monte Carlo Method. *Los Alamos Science*, 15, 125–130.

NIKOLAEV, M. N. (1976). Comments on the Probability Table Method. *Nuclear Science and Engineering*, 61, 286.

NIKOLAEV, M. N., IGNATOV, A. A., ISAEV, N. V. et KOKHLOV, V. F. (1970). The Method of Subgroups for Considering the Resonance Structure of the Cross-sections in Neutron Calculation (PART 1). *Atomnaya Énergiya*, 29, 11–16.

NIKOLAEV, M. N., IGNATOV, A. A., ISAEV, N. V. et KOKHLOV, V. F. (1972). The Method of Subgroups for Considering the Resonance Structure of the Cross-sections in Neutron Calculation (PART 2). *Atomnaya Énergiya*, 35, 29–32.

OECD/NEA (2002). *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments*. Rapport technique NEA/NSC/DOC(95)03/0I-VII, Nulcear Energy Agency, Organisation for Economic Co-operation and Development.

PETROVIC, I. et BENOIST, P. (1996). B_N theory : Advances and New Models for Neutron Leakage Calculation. *Advances in Nuclear Science and Technologies*, 24.

REYSSET, T. (2009). *Development And Qualification of Advanced Computational Schemes for Pressurized Water Reactors and Creation of Specific Interfaces Towards GRS Full-core Tools*. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

RIBON, P., COSTE-DELCLAUX, M., JOUANNE, C. et DIOP, C. M. (2008). Angular Anisotropy Representation by Probability Tables. *PHYSOR-2008, Int. Conf. on the physics of reactors*. Interlaken, Switzerland.

RIBON, P. et MAILLARD, J. (1986). *Les tables de probabilité. Application au traitement des sections efficaces pour la neutronique*. Rapport technique CEA-N-2485, Commissariat à l'Energie Atomique.

ROWLANDS, J. (1999). *LWR Pin Cell Benchmark Intercomparisons. An Intercomparison Study Organized by the JEFF Project, with Contributions from the UK, France, Germany, The Netherlands, Slovenia and the USA* . Rapport technique, Organization for Economic Co-operation and Development.

SANCHEZ, R. (2009). Assembly Homogenization Techniques for Core Calculations. *Progress in Nuclear Energy*, 51, 14–31.

SANCHEZ, R., MONDOT, J., STANKOVSKI, Z., COSSIC, A. et ZMIJAREVIC, I. (1988). APOLLO2 : a user oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 100, 352–362.

SHIM, H., CHO, J. Y., SONG, J. S. et KIM, C. H. (2008a). Generation of few group diffusion theory constants by Monte Carlo code. *Transactions of the American Nuclear Society*, 99, 343–345.

SHIM, H. J., CHO, J. Y., SONG, J. S. et KIM, C. H. (2008b). Generation of few group diffusion theory constants by Monte Carlo code. *Transactions of the American Nuclear Society*, 99, 343–345.

SPANIER, J. et GELBARD, E. M. (1969). *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*. Addison-Wesley, Mass.

SUBLET, J., RIBON, P. et COSTE, M. (2002). *CALENDF-2002 : Manuel d'Utilisation*. Rapport technique CEA-R-6020, Commissariat à l'Energie Atomique.

VALLERENT, R. (2009). *Développement et Validation de Schémas de Calcul à Double Niveau Pour les Réacteurs à Eau Pressurisée*. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

WEISSTEIN, E. W. (2010). Legendre Polynomial. *From MathWorld–A Wolfram Web Resource*, http ://mathworld.wolfram.com/LegendrePolynomial.html.

WOODCOCK, E. (1965). *Techniques Used in the GEM code for Monte Carlo Neutronics Calculations in Reactors and Other Systems of Complex Geometry*. Rapport technique, Argonne National Laboratory.

YAMAMOTO, T. et TAKEDA, T. (2000). Reaction Rate Calculation in Fast Reactor Blanket Using Multiband S_n Theory. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 37(5), 428–435.

YUN, S. et CHO, N. Z. (2010). Monte Carlo Depletion under Leakage Corrected Critical Spectrum via Albedo Search. *Nuclear Engineering and Technology*, 42, 271–278.

ZHENG, S., VERGNAUD, T. et J.C., N. (1998). Neutron Cross-Section Probability Tables in TRIPOLI-3 Monte Carlo Transport Code. *Nuclear Science and Engineering*, 128, 321–328.

Annexe I
GUIDE UTILISATEUR DU CODE MC:

TECHNICAL REPORT
IGE–322

THE MONTE CARLO TRANSPORT SOLVER MC:

N. Martin

Institut de génie nucléaire
Département de génie mécanique
École Polytechnique de Montréal
February 23, 2011

CONTENTS

LIST OF FIGURES

LIST OF TABLES

1 INTRODUCTION

The Monte Carlo solver MC: described in this document is built as an independent module in a developing version of the DRAGON code [1], wrapped with the GANLIB 5 driver [2]. The input file is consequently written in the CLE-2000 language following the instructions of the GANLIB 5 documentation, which is quite similar to previous GANLIB versions from an user's point of view. Others relevant modules such as LIB: are identical to the tagged version and relevant instructions can be found in [3].

An obsolete multigroup Monte Carlo module was introduced in [4, 5] and documented in [3]. The code has since been completely rewritten, and any input file made originally for the old version should be converted using the following instructions. In particular, the need to use the GEO: module together with the NXT: tracking operator has been removed. The geometry is given now as a parameter and defined during the call to the MC: module. At this time, classical 1D (slab, cylindrical and spherical) geometries along with 2D/3D regular lattices and clusters can be modelled. Typical applications of the MC: are PWR and CANDU cells and assemblies [6, 7]. Note that geometrical capabilities can be easily expanded.

Majors features of this solver are the possibility of performing Monte Carlo criticality calculations using:

- Microscopic cross sections, typically on the form of probability tables for resonant isotopes. In this case, a preliminary call to the LIB: module is necessary. Only CALENDF-like probability tables should be used in this case (option PTMC). The module recognizes the L_MICROLIB signature of the input library and recopies the pertinent information. It is however possible to force the use of the embedded macrolib (see Sect. 4).

- Macroscopic cross sections, where the input library possesses the L_MACROLIB signature. These data can be processed by the MAC:, LIB: or EDI: modules of the DRAGON code.

Note that only Draglib-formatted input libraries [8] with the SHEM–295 [9] or SHEM–361 [10] groups can be used in the microscopic case. Only Monte Carlo criticality calculations with the power iteration method can be realized with the MC: module (no fixed source problems).

2 GENERAL STRUCTURE OF THE MC: INPUT

The calling specifications are:

Table 1: Structure **(MC:)**

OUTMC := `MC:` { *MICRO* | *MACRO* } :: **(MC_data)**

where

OUTMC `character*12` name of a MONTE-CARLO (type `L_MC`) object open in creation mode.

MICRO `character*12` name of a MICROLIB (type `L_LIBRARY`) object open in read-only mode.

MACRO `character*12` name of a MACROLIB (type `L_MACROLIB`) object open in read-only mode.

MC_data input data structure containing specific data.

There is three different entries for the `MC:` module. The first one is related to the geometrical definition of the problem and is described in Sect. 3.

The second entry, described in Sect. 4 is related to the definition of parameters for the Monte Carlo transport simulation itself.

The last entry is optional and related to the instructions for group constant generations, i.e., the directives for the homogenization and condensation of cross sections and is described in Sect. 5.

Table 2: Structure **(MC_data)**

[`EDIT` *iprint*]
`GEO`
    (GEO_data)
`END_GEO`
`SIMUL`
    (SIMUL_data)
`END_SIMUL`
[`TALLY`]
[**(TALLY_data)**]
[`END_TALLY`]
 	
;

The geometry card is encapsulated between tags `GEO` and `END_GEO`. The Monte Carlo parameters are given between tags `SIMUL` and `END_SIMUL`. Note that these two entries are mandatory for any Monte Carlo simulation with the `MC:` module. One can optionally define a tally card for editing reaction rates.

3 DESCRIPTION OF THE GEO CARD

Table 3: Structure **(GEO_data)**

```
GEO
(descCELL)
[(descLATTICE)]
[(descBC)]
END_GEO
;
```

where **(descCELL)** is a structure defining a geometry cell. At this time, the following geometries can be modelled:

Table 4: Structure **(descCELL)**

```
{ INF | CAR1D | PIN | SPHERE | CAR2D | CAR2D | CAR3D}
```

`INF` **infinite, homogeneous geometry**. The following instructions must be provided:

Table 5: Structure **(descINF)**

`MIX` *imix*

with

`MIX` keyword used to specify which mixture fills the region and *imix* corresponds to the mixture number defined in the internal library.

`CAR1D`, `PIN`,`SPHERE` **1D Cartesian/cylindrical/spherical geometry**. In these 1D cases, the following instructions must be provided:

Table 6: Structure **(desc1D)**

nreg
`MIX` $(imix(ireg), ireg = 1, nreg\ )$

nreg is the number of regions in the 1D cell.

`MIX` keyword used to specify which mixture fills the region.

imix array of mixture numbers.

`CAR2D`, `CAR3D`: **2D/3D Cartesian geometry**. The following instructions must be provided:

Table 7: Structure **(descCARCEL)**

```
Cid
[PIN npin RPIN rpin(i),i=1,npin ]
MIX (imix(ipin), ipin = 1, npin )
```

`Cid` is the cell identifier, where *id* is an integer.

`PIN` serves to include a centered pin into the Cartesian cell. In this case, the number of concentric cylindrers *npin* should also be provided.

`RPIN` the radius vector *rpin* coming from the inner to the outer cylinder.

`MIX` keyword used to specify which *imix* mixture fills the region.

`CLUSTER`: **cylindrical cluster geometry**. The following instructions must be provided:

Table 8: Structure **(descCLUSTER)**

```
CLUSTER ncluster
(NPIN npin RPIN rpin APIN apin) repeat for each cluster
```

where

`CLUSTER` keyword to specify that a cylindrical cluster array follows

ncluster number of imaginary cylinder where the centers of the pins are to be placed to define the cluster arrays.

`NPIN` keyword to specify the number of pins located in a cluster geometry.

npin the number of pins associated with this sub-geometry.

`RPIN` keyword to specify the radius of an imaginary cylinder where the centers of the pins are to be placed.

rpin the radius (cm) of an imaginary cylinder where the centers of the pins are to be placed.

`APIN` keyword to specify the angle of the first pin centered on an imaginary cylinder in a cluster geometry.

apin angle (radians) of the first pin centered on an imaginary cylinder in a cluster geometry.

The **(descLATTICE)** must be used in order to model typical regular lattices of Cartesian cells, with the following format:

Table 9: Structure **(descLATTICE)**

```
LATTICE nx ny nz
```

continued on next page

Structure **(descLATTICE)** continued from last page

$(C(i), i = 1, nx \times ny \times nz)$
X ($xx(i), i = 1, nx + 1$)
Y ($yy(i), i = 1, ny + 1$)
[Z ($zz(i), i = 1, nz + 1$)]

Note that even in the case of a single cell, the **(descLATTICE)** entry should be used with $nx = ny = nz = 1$.

The last entry in the GEO card is related to the definition of the boundary conditions. GEO: notations have been kept in this case.

Table 10: Structure **(descBC)**

X- { VOID | REFL [SPEC | ISO | ALBEDO *alb*] | TRAN }
X+ { VOID | REFL [SPEC | ISO | ALBEDO *alb*] | TRAN }
Y- { VOID | REFL [SPEC | ISO | ALBEDO *alb*] | TRAN }
X+ { VOID | REFL [SPEC | ISO | ALBEDO *alb*] | TRAN }
Z- { VOID | REFL [SPEC | ISO | ALBEDO *alb*] | TRAN }
Z+ { VOID | REFL [SPEC | ISO | ALBEDO *alb*] | TRAN }
R+ { VOID }

X-/X+ keyword to specify the boundary conditions associated with the negative or positive X surface of a Cartesian geometry.

Y-/Y+ keyword to specify the boundary conditions associated with the negative or positive Y surface of a Cartesian geometry.

Z-/Z+ keyword to specify the boundary conditions associated with the negative or positive Z surface of a Cartesian geometry.

R+ keyword to specify the boundary conditions associated with the negative or positive outer surface of a cylindrical or spherical geometry. At this time, only VOID boundary conditions are possible with these surfaces.

VOID keyword to specify that the surface under consideration has zero re-entrant angular flux. This side is an external surface of the domain.

REFL keyword to specify that the surface under consideration has a reflective boundary condition. Specular (mirror-like) boundary conditions are set by default. It can be switched toward isotropic or albedo-like (albedo value=*alb*) boundary conditions with the keywords ISO and ALBEDO, respectively.

TRAN keyword to specify that the surface under consideration have periodic boundary conditions. This boundary condition is valid only in symmetrical lattices.

4 DESCRIPTION OF THE SIMUL CARD

This input card is intended to define the Monte Carlo simulation parameters: number of source neutrons, number of cycles, number of skipped cycles, etc.

This card serves also to set important physical parameters, such as the anisotropy scattering model and the sort of input cross sections to be used during the simulation.

Table 11: Structure **(SIMUL_data)**

```
KCODE nsrck ikz kct [ KEFF keff ] [ SIGMA sigma ] [ SEED iseed ] [ REPLAY ngame ]
[ MACRO ] [ N2N | NO-N2N ] [ NOPT ] [ CORR ]
[ TRAN | ANIS [ ISO | COV | LUX | DAT ]
[ TYPE B1 ACTIVE nactive ]
```

`KCODE`	keyword to specify the Monte Carlo power iteration parameters.
nsrck	neutron source population (usually between 5000 and 100000).
ikz	number of inactive cycles (between 20 and 100).
kct	total number of cycles (at least 500).
`KEFF`	keyword to set the initial K_{eff}.
keff	initial K_{eff}. Default value set to $K_{\text{eff}} = 1$.
`SIGMA`	keyword to set the endorsed standard deviation for the K_{eff}.
sigma	endorsed standard deviation (in pcm) for the K_{eff}, typically 10.0 50.0. Default value set to 50.0 pcm.
`SEED`	keyword to initialize the pseudo-random number generator.
iseed	integer set to initialize the pseudo-random number generator. The internal CPU clock is used by default.
`REPLAY`	keyword to replay the Monte Carlo game within the `MC:` module. A different simulation will occur using another random numbers.
ngame	Number of Monte Carlo game. Default set to one.
`MACRO`	keyword to force the use of the embedded macrolib in case of an internal library with L_MICROLIB signature.
`N2N`	keyword to activate the recovery of the $(n, 2n)$ cross sections in the internal library (default options).
`NO-N2N`	keyword to deactivate the recovery of the $(n, 2n)$ cross sections in the internal library.
`NOPT`	keyword to deactivate the use of probability tables. Infinite-dilution values are used. Warning: this should be used with caution, typically to estimate the self-shielding effect.
`CORR`	keyword to activate the use of correlated weights during the sampling of the probability tables. The keyword `CORR` should also be set in the `LIB:` module. See [3], Sect 1.2 for informations regarding the generation of probability tables.

TRAN	keyword to use the transport-corrected cross sections. The CTRA keyword must have been set in the LIB: module.
ANIS	keyword used to define the scattering laws. Four scattering models can be chosen:
ISO	isotropic scattering (in the LAB frame), which is the default option.
COVE	The Coveyou method is applied [12]. This semi-analytic method conserves linearly anisotropic scattering. At least P_1 scattering cross sections must be used in input.
LUX	The Lux method is applied [11]. This method ensures the conservation of the scattering law up to the P_3 order. At least P_3 scattering cross sections must be used in input.
DAT	A combination of Coveyou, Lux and the Discrete Angle Technique is used when transfer cross sections are at least expanded at the P_5 order. The Discrete Angle Technique is used when transfer moments are consistent at the $P_{n\geq 5}$ order, and substituted by Lux method (only P_3 moments are consistent) and Coveyou method (only P_1 moments are consistent). A specific Draglib should consequently be used, and the Legendre order L in the LIB: module must be at least 6.
TYPE	keyword to specify the kind of leakage model to be used during the Monte Carlo criticality calculation.
B1	keyword to specify the use of a leakage model based on the B_1 fundamental approximation.
ACTIVE	keyword to set the number of inactive cycles before starting the leakage model.
nactive	number of inactive cycles before starting the leakage model (usually between 20 to 50).

5 DESCRIPTION OF THE TALLY CARD

This section describes how to define tallies using the `MC:` module. This entry is mandatory when the edition of reaction rates and cross sections is seeked. Similarities exist with the call of the `EDI:` module of DRAGON, typically by the reuse of some keywords.

Table 12: Structure **(TALLY_data)**

`MERGE` { `NMERGE` *nmerge* `MIX` *mix*(imix(i)),i=1,nmerge | `COMP` | `NONE` }
`COND` { `NGCOND` *ngcond* *grp*(igr(i)),i=1,ngcond | `ALL` | `NONE` }

where

`MERGE` keyword to specify that the neutron flux is to be homogenized over specific mixtures.

`NMERGE` keyword to set the number of mixtures in the merged geometry.

nmerge number of different mixtures in the merged geometry.

`MIX` keyword to specify that the homogenization of the neutron flux will take place over the following mixtures.

mix array of homogenized mixtures. Setting $mix(i) = 0$ means that the mixture will not be used during the homogenization.

`NONE` keyword to set no homogenization over the geometry.

`COMP` keyword to specify a complete homogenization of the geometry.

`COND` keyword to specify that a group condensation of the flux is to be performed.

`NGCOND` keyword used to set the number of resulting groups.

ngcond integer defining the dimension of the array *grp*.

grp array for the group condensation directive.

When the `TALLY` card is used, an additional output file in a matlab-like format is generated. This file contains reaction rates for all the merged mixtures and isotopes. It can be open by matlab or octave to make direct comparisons.

6 EXAMPLES OF GEOMETRIES

6.1 2D pin cell

A classical 2D square pin cell can be defined using the following input in the GEO card. The resulting geometry is plotted in figure 1:

```
GEO
CAR2D C1
MIX 3
PIN 2 0.4 0.45
MIX 1 2
LATTICE 1 1 1 C1
X 0.0 1.20
Y 0.0 1.20
X- REFL X+ REFL
Y- REFL Y+ REFL
END_GEO
```

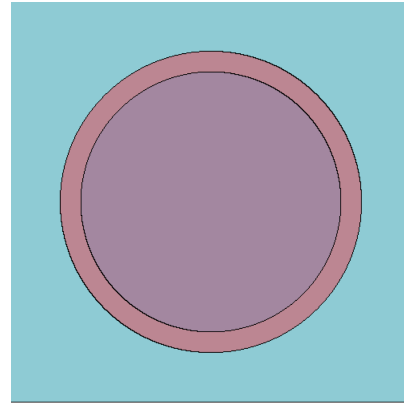


Figure 1: 2D pin cell

6.2 CANDU-6 cell

A CANDU-6 cluster cell can be defined using the following parameters:

```
GEO
!fuel pins
PIN C1
0.6122 0.6540
MIX 6 10
PIN C2 2
0.6122 0.6540
MIX 7 10
PIN C3
2  0.6122 0.6540
MIX 8 10
PIN C4 2
0.6122 0.6540
MIX 8 10
!CAR2D with cylindrical cluster
CAR2D C5
MIX 5
PIN 4  5.16890 5.60320 6.44780 6.58750
MIX 1 2 3 4
CLUSTER 4 NPIN 1 RPIN 0.0000 APIN 0.0000
C1
NPIN  6 RPIN 1.4885 APIN 0.0000
C2 C2 C2 C2 C2 C2
NPIN 12 RPIN 2.8755 APIN 0.261799
C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3
NPIN 18 RPIN 4.3305 APIN 0.0
 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4
LATTICE 1 1 1 C5
X  -14.2875  14.2875
```

```
Y  -14.2875  14.2875
X- REFL X+ REFL ! specular reflective BC
Y- REFL Y+ REFL
END_GEO
```

A classical fuel bundle with 37 fuel pins is displayed at the Figure 2, with a lattice pitch of 28.575 cm.

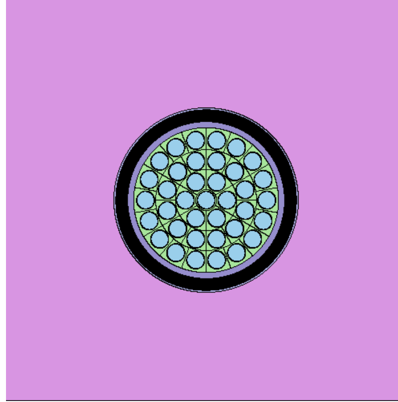


Figure 2: 2D cylindrical cluster cell

6.3 PWR assembly

A classical PWR assembly containing 17 × 17 pins can be defined using the following parameters:

```
GEO
CAR2D C1!fuel cell
MIX 3
PIN 2 0.4126 0.474
MIX 1 2
CAR2D C2! water hole
MIX 3
PIN 2  0.571 0.613
MIX 3 2
LATTICE 17 17 1 !17*17 assembly
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C2 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C2 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C2 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C2 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
! the lattice pitch is 1.262 cm
MESHX 0.0 1.262 2.524 3.786 5.048 6.31 7.572  8.834 10.096 11.358
  12.62 13.882 15.144 16.406 17.668 18.93 20.192 21.454
```

```
MESHY 0.0 1.262 2.524 3.786 5.048 6.31 7.572  8.834 10.096 11.358
 12.62 13.882 15.144 16.406 17.668 18.93 20.192 21.454
X- TRAN X+ TRAN ! periodic BC
Y- TRAN Y+ TRAN
END_GEO
```

The geometry is displayed in Fig. 3.

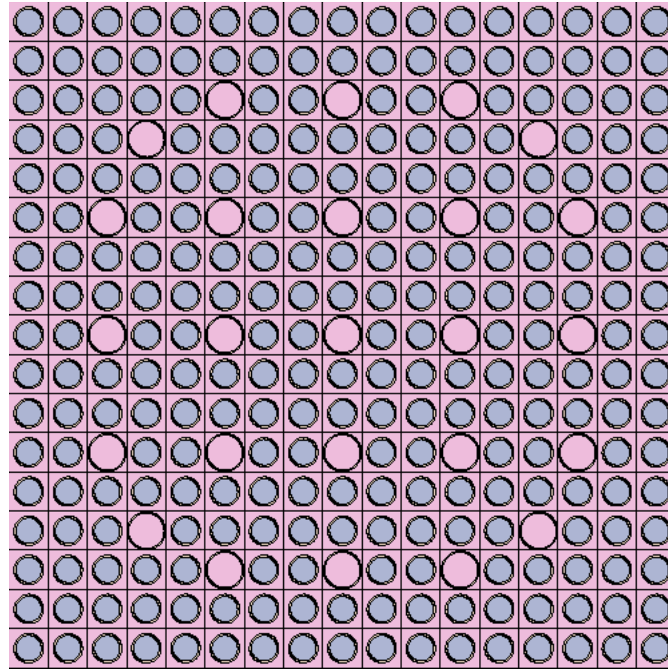


Figure 3: 2D PWR assembly

7 FULL EXAMPLES OF INPUT

The test cases considered here use a Draglib input library with the SHEM–295 or SHEM–361 group structure. The call to the `LIB:` module is identical to those displayed in the documentation [3] with CALENDF probability tables (`PTMC`) computed for resonant isotopes in resonant groups.

7.1 UOX Pin cell case with B_1 fundamental mode leakage

This input file is a Monte Carlo criticality calculation performed with a leakage model on a simple 2D square pin cell.

Input data for test case: **pincelluo2.x2m**

```
!----
!  UO2 Rowlands case 1
! SHEM-295 Jef2.2-based library
! input for the MC: module
!  Author: N. Martin
!----
!define structures and modules used
LINKED_LIST LIBRARY OUTMC ;
MODULE LIB: MC:  ;

LIBRARY := LIB: ::
 EDIT 1
 NMIX 3
 CTRA NONE
 ANIS 1 ! P0 scattering cross sections
 CALENDF 4 PTMC !CALENDF-like probability tables
 MIXS LIB: DRAGON FIL: DLIB_295
 MIX 1 293.0
    O16     = O16    4.6624E-2
    U235    = U235   7.0803E-4  1 IRSET PTMC 1
    U238    = U238   2.2604E-2  1 IRSET PTMC 1
 MIX 2 293.0
    Zr0     = Zr0    4.3241E-2  2 IRSET PTMC 1
 MIX 3 293.6
    H1      = H1_H2O 6.6988E-2
    O16     = O16    3.3494E-2
 ;

OUTMC := MC: LIBRARY ::
GEO
CAR2D C1
MIX 3
PIN 2 0.4 0.45
MIX 1 2
LATTICE 1 1 1 C1
X 0.0 1.20
Y 0.0 1.20
X- REFL X+ REFL
Y- REFL Y+ REFL
END_GEO
SIMUL
NO-N2N
```

```
!skip 10 cycles
KCODE 10000 10 2000 SIGMA 10.0
!active b1 leakage model at the 10+10=20st iteration
TYPE B1 ACTIVE 10
END_SIMUL
TALLY
MERGE COMP! complete homogenization
COND NONE!no condensation: keep the 295-group structure
END_TALLY
;
QUIT "LIST" .
```

7.2 Godiva critical experiment

This input file corresponds to the HEU-MET-FAST-001 experiment from the ICSBEP handbook [13].

Input data for test case: **godiva.x2m**

```
!--------------
! godiva experiment: HEU-MET-FAST-001
! keff = 1.000 +/- 100 pcm
! Input file for MC:
! N. Martin (2010)
!-------------
LINKED_LIST LIBRARY OUTMC ;
MODULE LIB: MC:  ;
LIBRARY := LIB: ::
 EDIT 0
 NMIX 1
 CTRA NONE
 ANIS 8 !P7 Legendre order
 CALENDF 4 PTMC! CALENDF probability tables
MIXS LIB: DRAGON FIL: DLIB_295
 MIX 1 293.0 (*COMB0101*)
 U235 = U235 4.49940E-02   1 IRSET PTMC 1
 U238 = U238 2.49840E-03   1 IRSET PTMC 1
 U234 = U234 4.91840E-04   1 IRSET PTMC 1
 ;
OUTMC := MC: LIBRARY ::
EDIT 0
GEO
SPHERE 1 ! 1D spherical geometry (void at external surface)
RADIUS 8.7407
MIX 1
END_GEO
SIMUL
KCODE 5000 50 550
SIGMA 50.0
ANIS DAT !discrete angle technique
END_SIMUL
;
QUIT "LIST" .
```

7.3 CANDU-6 cell

This input file is a model of a CANDU-6 cell.

Input data for test case: **candu.x2m**

```
!----
! MC: test case
! CANDU-6 test case adapted from TEST CASE TCWU07
! jeff3.1 input library
! N. Martin (2010)
!----

LINKED_LIST
  LIBRARY LIBRARY2 CANDU6S CANDU6T CANDU6SV CANDU6TV TRACK
  OUTMC SYS FLUX EDITION ;
MODULE
  GEO: MC: LIB: END: ;

!----
! JEFF3.1-based SHEM295 input library
!----
LIBRARY := LIB: ::
  EDIT 3
  ANIS 6! P5 scattering cross sections
  NMIX 10
  PTMC
  CALENDF 4 ! CALENDF probability tables
  MIXS LIB: DRAGON FIL: DLIB_J3
  !Coolant water
  MIX  1  550.6   0.81212
    O16       = O16      7.99449E-1
    H2_D2O    = H2_D2O   1.99768E-1
    H1_H2O    = H1_H2O   7.83774E-4
  !Pressure tube
  MIX  2  550.6   6.57
    Nb93     = Nb93     2.50000
    B11      = B11      2.10000E-4
    Zr91     = Zr91     9.75000E+1 1 IRSET PTMC 1
  MIX  3  345.6   0.0014
   He4      = He4      1.00000E+2
  !Calandria tube
  MIX  4  345.6   6.44
    Fe56     = Fe56     1.60000E-1
    Ni58     = Ni58     6.00000E-2
    Cr52     = Cr52     1.10000E-1
    B11      = B11      3.10000E-4
    Zr91     = Zr91     9.97100E+1 2 IRSET PTMC 1
  !Moderator water
  MIX  5  345.6   1.082885
    O16      = O16      7.98895E-1
    H2_D2O    = H2_D2O  2.01016E-1
    H1_H2O    = H1_H2O  8.96000E-5
  !fuel
  MIX  6  941.3  10.4375010
    O16      = O16      1.18473E+1
```

```
    U235     = U235     6.27118E-1 3 IRSET PTMC 1
    U238     = U238     8.75256E+1 3 IRSET PTMC 1
  MIX  7  COMB 6 1.0
  MIX  8  COMB 6 1.0
  MIX  9  COMB 6 1.0
  !cladding
  MIX 10   560.6   6.44
    Fe56     = Fe56     1.60000E-1
    Ni58     = Ni58     6.00000E-2
    Cr52     = Cr52     1.10000E-1
    B11     =  B11      3.10000E-4
    Zr91     =  Zr91    9.97100E+1 4 IRSET PTMC 1
  ;

OUTMC := MC: LIBRARY ::
EDIT 4
GEO
!fuel pins
PIN C1
2  0.6122 0.6540
MIX 6 10
PIN C2
2  0.6122 0.6540
MIX 7 10
PIN C3
2  0.6122 0.6540
MIX 8 10
PIN C4
2  0.6122 0.6540
MIX 8 10
!CAR2D with cylindrical cluster
CAR2D C5
MIX 5
PIN 4  5.16890 5.60320 6.44780 6.58750
MIX 1 2 3 4
CLUSTER 4
NPIN  1 RPIN 0.0000 APIN 0.0000
C1
NPIN  6 RPIN 1.4885 APIN 0.0000
 C2 C2 C2 C2 C2 C2
NPIN 12 RPIN 2.8755 APIN 0.261799
 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3 C3
NPIN 18 RPIN 4.3305 APIN 0.0
 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4 C4
LATTICE 1 1 1
C5
X  -14.2875  14.2875
Y  -14.2875  14.2875
X- REFL X+ REFL ! specular reflective BC
Y- REFL Y+ REFL
END_GEO
SIMUL
KCODE 10000 20 1000
SIGMA 5.0
ANIS DAT! discrete angle technique
```

```
END_SIMUL
TALLY
  MERG COMP! complete homogenization
  COND NGCOND 4 ! four condensed groups
   36 55 206
END_TALLY
;

END: ;
QUIT "LIST" .
```

7.4 PWR assembly

This is an example of a PWR assembly case with 17×17 pin cells.

Input data for test case: **assembuo2.x2m**

```
!--------------
! PWR assembly test case
! UO2 (3.25 initial enrichment burned up to 25 MWd/kgU)
! Based on a Serpent input file
! N. Martin (2010)
!--------------
LINKED_LIST GEOM OUTMC LIBRARY MACRO ;
MODULE  MC: LIB: DELETE: END: ;
SEQ_ASCII TEST ;
!--------
! Input library based on the Jeff3.1 evaluation (SHEM295 structure)
!--------
 LIBRARY := LIB: ::
 EDIT 0
 NMIX  3
 CTRA NONE
 ANIS 2
 CALENDF 4 PTMC
 MIXS LIB: DRAGON FIL: DLIB_J3
 MIX 1 900.0 !fuel
    U235   = U235  3.0000E-04  1 IRSET PTMC 1
    U236   = U236  8.0000E-05  1 IRSET PTMC 1
    U238   = U238  2.0000E-02  1 IRSET PTMC 1
    Np237  = Np237 7.1000E-06  1 IRSET PTMC 1
    Pu238  = Pu238 1.7000E-06  1 IRSET PTMC 1
    Pu239  = Pu239 1.2000E-04  1 IRSET PTMC 1
    Pu240  = Pu240 3.8000E-05  1 IRSET PTMC 1
    Pu241  = Pu241 2.1000E-05  1 IRSET PTMC 1
    Pu242  = Pu242 5.3000E-06  1 IRSET PTMC 1
    Am241  = Am241 4.2000E-07  1 IRSET PTMC 1
    Xe131  = Xe131 1.4000E-05
    Xe135  = Xe135 8.0000E-09
    Eu153  = Eu153 2.8000E-06
    Sm149  = Sm149 9.0000E-08
    Ru103  = Ru103 1.8000E-05
    Nd143  = Nd143 2.5000E-05
    Cs133  = Cs133 3.5000E-05
    Gd155  = Gd155 8.4000E-10  1 IRSET PTMC 1
    Tc99   = Tc99  3.2000E-05
```

```
    Mo95   = Mo95  3.2000E-05  1 IRSET PTMC 1
    Pm147  = Pm147 6.4000E-06
    Sm150  = Sm150 7.5000E-06
    Sm151  = Sm151 4.1000E-07
    Sm152  = Sm152 3.2000E-06
    O16    = O16 4.5100E-02
 MIX 2 600.0 !cladding
    Zr90   =  Zr90  3.9550E-02 2 IRSET PTMC 1
    Fe56   =  Fe56  1.3830E-04
    Cr52   =  Cr52  7.0720E-05
    O16    =  O16   2.8740E-04
 MIX 3 573.6 !moderator
    H1     = H1_H2O 4.7240E-02
    O16    = O16    2.3620E-02
    B10    = B10     4.3210E-06
    B11    = B11     1.7390E-05
 ;
OUTMC := MC: LIBRARY ::
EDIT 1
GEO
CAR2D C1!fuel cell
MIX 3
PIN 2 0.4126 0.474
MIX 1 2
CAR2D C2! water hole
MIX 3
PIN 2  0.571 0.613
MIX 3 2
LATTICE 17 17 1 !17*17 assembly
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C2 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C2 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C2 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C2 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C2 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1 C1
MESHX 0.0 1.262 2.524 3.786 5.048 6.31 7.572  8.834 10.096 11.358
  12.62 13.882 15.144 16.406 17.668 18.93 20.192 21.454
MESHY 0.0 1.262 2.524 3.786 5.048 6.31 7.572  8.834 10.096 11.358
  12.62 13.882 15.144 16.406 17.668 18.93 20.192 21.454
X- TRAN X+ TRAN ! periodic BC
Y- TRAN Y+ TRAN
END_GEO
Simul
KCODE 10000 50 1000
```

```
SEED 1234
SIGMA 50.0 ANIS COV !coveyou method
END_SIMUL
TALLY
MERG COMP !complete homogenization
COND NGCOND 2! two group condensationss
0.625 !limit set at 0.625 eV
END_TALLY
 ;
END: ;
```

7.5 Example of output

In the case where a `TALLY` card is given, the `MC:` module generates an additional *.m* file containing the reaction rates par homogenized mixtures. The statistical error is also computed. This file can then be easily edited with matlab or octave.

Input data for test case: **result.m**

```
%-------------------------------------------------------------%
% DRAGON-5 Monte Carlo matlab/octave-like edition output file  %
%-------------------------------------------------------------%


%   reaction_rate tally = [ 1:nmerge, ngcond:-1:1 , 1]
%   statistical error   = [ 1:nmerge, ngcond:-1:1 , 2]


nmerge =   1; % number of merged mixtures
ngcond =   1; % number of condensed groups


% Integrated flux
int_flux=zeros(  1,  1,  2);
% Collision rate
col_rate=zeros(  1,  1,  2);
% Self-scattering rate
ss_rate=zeros(  1,  1,  2);
% Absorption rate
abs_rate=zeros(  1,  1,  2);
% Nu*Fission rate
nsf_rate=zeros(  1,  1,  2);


%----
% Macroscopic reaction rates for merged mix   1
%----


%---- Integrated flux
int_flux(  1,:,:)=[...
    3.54332E+01    2.59566E-04
];
```

```
%---- Collision rate
mix_col_rate(  1,:,:)=[...
    3.16368E+01    3.31070E-04
];
%---- total scattering rate
mix_ss_rate(  1,:,:)=[...
    3.06347E+01    3.29035E-04
];
%---- Absorption rate
mix_abs_rate(  1,:,:)=[...
    1.00204E+00    4.93149E-04
];
%---- nu*Fission rate
mix_nsf_rate(  1,:,:)=[...
    1.39317E+00    6.20600E-04
];
```

REFERENCES

[1] G. Marleau, A. Hébert and R. Roy, "New Computational Methods Used in the Lattice Code DRAGON", *Top Mtg. on Advances in Reactor Physics*, Charleston, SC, March 8-11, (1992).

[2] A. Hébert and R. Roy, "The GANLIB version 5 developer's guide", Report IGE–313, École Polytechnique de Montréal, (2009).

[3] G. Marleau, R. Roy and A. Hébert, "A User Guide for DRAGON Version 4", Report IGE–294, École Polytechnique de Montréal (2006).

[4] B. Arsenault and R. Le Tellier, "Delta-Tracking Technique for Monte Carlo Calculations Applied to Neutron-Transport Simulations ", Report 153-123310-440-001, EACL, (2008).

[5] B. Arsenault and R. Le Tellier and A. Hébert, "Efficiency of the Delta-Tracking technique for Monte Carlo Calculations Applied to Neutron Transport Simulations of the Advanced CANDU Reactor Design", *PHYSOR-2008, Int. Conf. on the physics of reactors*, Interlaken, Switzerland,September 14-19, (2008).

[6] N. Martin and A. Hébert, "An Investigation on the Use of Probability Table Cross-sections in Monte Carlo Lattice Calculations", *PHYSOR-2010, International Topical Meeting in Reactor Physics*, Pittsburgh, PA, (2010).

[7] N. Martin and A. Hébert, "Probability Table Monte Carlo Method Applied to CANDU-6 Cell Calculations", *31st CNS Annual Conference*, Montréal, QC, (2010).

[8] A. Hébert and H. Saygin, "Development of Dragr for the Formatting of DRAGON Cross Section Libraries", *Seminar on NJOY-91 and THEMIS for the Processing of Evaluated Nuclear Data Files*, Saclay, France, (1992).

[9] A. Hébert, "Development of the subgroup projection method for resonance self-shielding calculations", *Nuclear Science and Engineering*, **162**, 56-75, (2008).

[10] A. Hébert and A. Santamarina, "Refinement of the Santamarina-Hfaiedh energy mesh between 22.5 eV and 11.4 KeV", *PHYSOR-2008, Int. Conf. on the physics of reactors*, Interlaken, Switzerland, (2008).

[11] I. Lux, "Semicontinuous Selection of Scattering Angles from Low-Order P_n Scattering Densities", *Nuclear Science and Engineering*, **82**, 332-337, (1982).

[12] I. Lux and L. Koblinger, "Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations", CRC Press, Boston, (1990).

[13] OECD/NEA, "International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments", Nulcear Energy Agency, Organisation for Economic Co-operation and Development, NEA/NSC/DOC(95)03/0I-VII, (2002).

INDEX